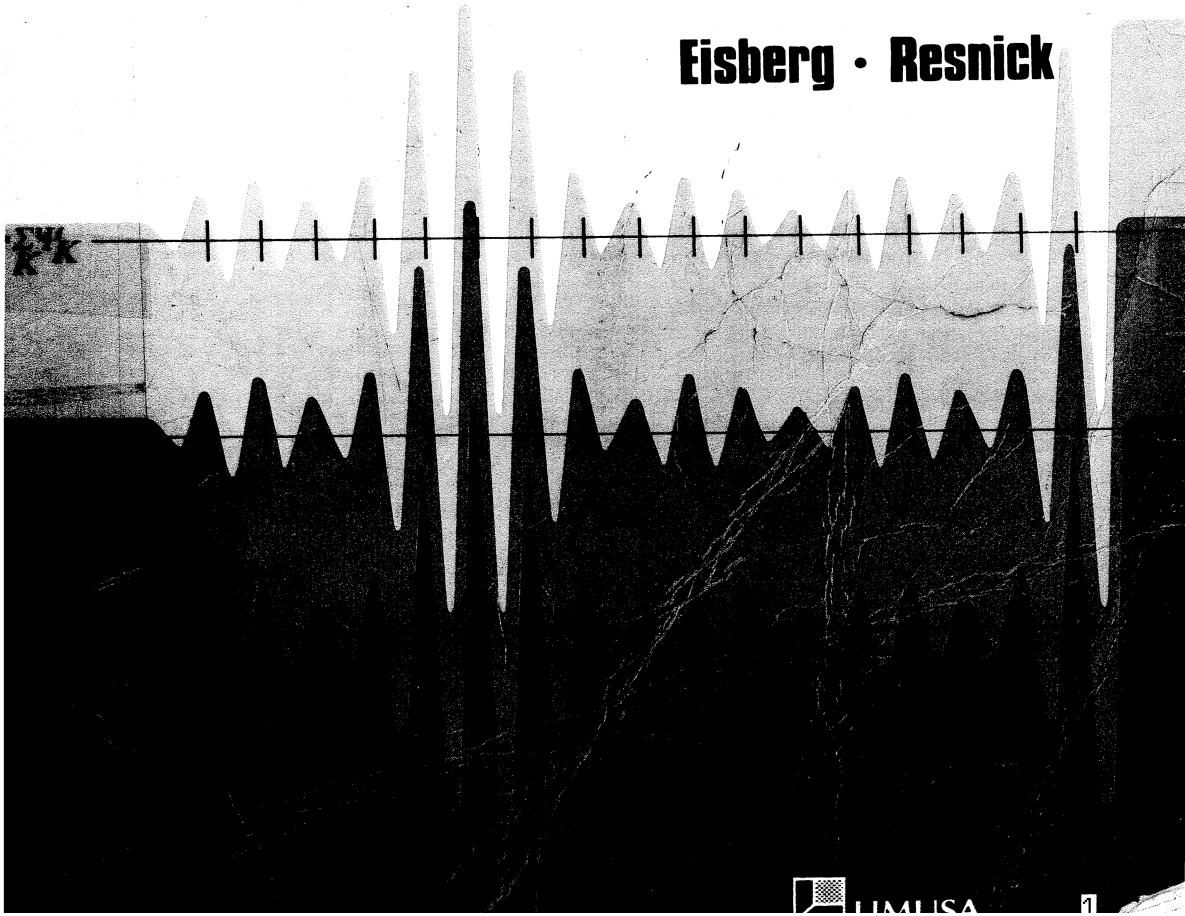
física cuántica

ÁTOMOS, MOLÉCULAS, SÓLIDOS, NÚCLEOS Y PARTÍCULAS

Eisberg · Resnick



LIMUSA

TEMAS QUE TRATA LA OBRA:

- **Radiación térmica y el postulado de Planck**

- **Fotones**
  Propiedades corpusculares de la radiación

- **Postulado de Broglie**
  Propiedades ondulatorias de las partículas

- **Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica**

- **Átomos con un electrón**

- **Momentos magnéticos dipolares, spin y razones de transición**

- **Átomos multielectrónicos**
  Estados base y excitaciones de rayos X

- **Átomos multielectrónicos**
  Excitaciones ópticas

- **Estadística cuántica**

- **Moléculas**

- **Sólidos**
  Conductores y semiconductores

- **Sólidos**
  Superconductores y propiedades magnéticas

- **Modelos nucleares**

- **Partículas elementales**

- **Apéndices de la A a la N**

física cuántica

ÁTOMOS, MOLÉCULAS, SÓLIDOS, NÚCLEOS Y PARTÍCULAS

física cuántica

ÁTOMOS, MOLÉCULAS, SÓLIDOS, NUCLEOS Y PARTÍCULAS

Robert Eisberg
Universidad de California, Santa Bárbara

y

Robert Resnick
Instituto Politécnico Rensselaer

LIMUSA
NORIEGA EDITORES
MÉXICO • España • Venezuela • Colombia

VERSIÓN AUTORIZADA EN ESPAÑOL DE LA OBRA PUBLICADA EN INGLÉS CON EL TÍTULO:
QUANTUM PHYSICS OF ATOMS, MOLECULES, SOLIDS, NUCLEI AND PARTICLES
© JOHN WILEY & SONS, INC.

COLABORADOR EN LA TRADUCCIÓN:
LEONEL COTA ARAIZA
FÍSICO INVESTIGADOR DEL INSTITUTO DE FÍSICA Y PROFESOR DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO. MAESTRÍA Y DOCTORADO DE FÍSICA DE SÓLIDOS EN LA UNIVERSIDAD DE WARWICK, INGLATERRA.

REVISIÓN:
GUILLERMO AGUILAR SAHAGÚN
DOCTOR EN FÍSICA. INVESTIGADOR DEL INSTITUTO DE FÍSICA Y PROFESOR DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.

LA PRESENTACIÓN Y DISPOSICIÓN EN CONJUNTO DE

FÍSICA CUÁNTICA. ÁTOMOS, MOLÉCULAS, SÓLIDOS, NÚCLEOS Y PARTÍCULAS

SON PROPIEDAD DEL EDITOR. NINGUNA PARTE DE ESTA OBRA PUEDE SER REPRODUCIDA O TRANSMITIDA, MEDIANTE NINGÚN SISTEMA O MÉTODO, ELECTRÓNICO O MECÁNICO (INCLUYENDO EL FOTOCOPIADO, LA GRABACIÓN O CUALQUIER SISTEMA DE RECUPERACIÓN Y ALMACENAMIENTO DE INFORMACIÓN), SIN CONSENTIMIENTO POR ESCRITO DEL EDITOR.

DERECHOS RESERVADOS:

© 1997, EDITORIAL LIMUSA, S.A. DE C.V.
GRUPO NORIEGA EDITORES
BALDERAS 95, MÉXICO, D.F.
C.P. 06040
☎ 521-21-05
91(800) 7-06-91
512-29-03
cnoriega@mail.internet.com.mx

CANIEM NÚM. 121

DUODÉCIMA REIMPRESIÓN

HECHO EN MÉXICO
ISBN 968-18-0419-8

Prólogo

El propósito básico de este libro es presentar el estudio claro y válido de las propiedades de la gran mayoría de los sistemas cuánticos importantes desde el punto de vista de la mecánica cuántica elemental. Sólo se desarrolla la mecánica cuántica necesaria para cumplir este fin. Por lo tanto, hemos decidido hacer énfasis en las aplicaciones de la teoría más que en la teoría misma. De esta manera, esperamos que el libro se adapte bien a las necesidades de los estudiantes contemporáneos en un curso que trate sobre los fenómenos de la física cuántica. A la vez que los estudiantes adquieren una perspectiva de las grandes aplicaciones de la mecánica cuántica, se verán motivados a aprender más acerca de la teoría. Por lo tanto, esperamos que el libro también se adapte bien a un curso que vaya seguido por otro más avanzado sobre mecánica cuántica formal.

En principio, el libro está pensado para usarse en un curso anual con estudiantes que ya hayan estudiado los conceptos elementales del cálculo diferencial e integral y la física clásica que los utiliza, aunque también se puede usar en cursos más cortos. En los capítulos del 1 al 4 se presentan los distintos fenómenos de la física cuántica moderna y se desarrollan las ideas esenciales de la teoría cuántica antigua. Estos capítulos se pueden cubrir muy rápidamente, sobre todo con aquellos estudiantes que han recibido una introducción previa a la física cuántica. La clave de la mecánica cuántica y sus aplicaciones a los átomos con uno y dos electrones se encuentra en los capítulos del 5 al 8 y las cuatro primeras secciones del capítulo 9. Es posible cubrir bien esta parte en menos de un semestre. Por lo tanto, el profesor puede formar una gran variedad de cursos cortos añadiendo a este material central algunos de los temas que se presentan de manera independiente en otros capítulos como son: átomos multielectrónicos y moléculas, estadística cuántica y sólidos, núcleos y partículas.

Los profesores que requieren un tratamiento similar de la mecánica cuántica, pero más extenso y a mayor nivel, y quienes puedan usar un tratamiento más formal de las aplicaciones de la teoría, pueden usar en vez de este libro el texto "FUNDAMENTOS DE FISICA MODERNA" por Robert Eisberg (Editorial LIMUSA, 1973). A los profesores que requieran un estudio más completo de la relatividad especial que el que se expone en

el apéndice A, pero similar en nivel y estilo pedagógico al presentado en este libro, les recomendamos usar como complemento el texto "INTRODUCCION A LA TEORIA ESPECIAL DE LA RELATIVIDAD" por Robert Resnick (Editorial LIMUSA, 1977).

Mediante un experimento que consistió en realizar pruebas intensivas con los alumnos de nuestras respectivas instituciones así como en otras cuatro escuelas desarrollamos una serie de ediciones preliminares. Durante este proceso Robert Eisberg completó este libro mediante una revisión exhaustiva y una extensión considerable de la última edición preliminar. Por lo tanto, él es el autor principal de esta obra. Por su parte, Robert Resnick ha tomado la iniciativa de revisar y extender la ultima edición preliminar con el fin de preparar el manuscrito para un libro de física moderna a un nivel un poco inferior. Por tanto, él sera ese autor principal de este libro.

Las características pedagógicas del libro, algunas de las cuales no se encuentran por lo general en libros de este nivel, demostraron ser muy eficientes cuando se probaron en el aula. Estas características son: descripciones detalladas al principio de cada capítulo, numerosos ejemplos resueltos, secciones opcionales en los capítulos y apéndices también opcionales; resúmenes y tablas, conjuntos de preguntas al final de cada capítulo y conjuntos extensos y variados de problemas cuidadosamente verificados al final de cada capítulo con subconjuntos de respuestas al final del libro. Por lo tanto, pensamos que este libro es adecuado tanto para cursos de autoaprendizaje como para cursos autorregulados.

Hemos empleado el sistema de unidades MKS (o SI) pero de una manera flexible, donde la experiencia en un campo particular lo indica se han utilizado unidades alternativas.

Es una gran satisfacción expresar nuestro agradecimiento a los Doctores Harriet Forster, Russell Hobbie, Stuart Meyer, Gerhard Salinger y Paul Yergin por sus revisiones constructivas, al Doctor David Swedlow por su ayuda en la evaluación y solución de los problemas, al Doctor Benjamin Chi por su ayuda con las figuras, al señor Donald Deneck por su ayuda editorial y a las señoras Cassie Young y Carolyn Clemente por el trabajo de mecanografía y otros servicios secretariales.

Santa Bárbara, California — *Robert Eisberg*
Troy, Nueva York — *Robert Resnick*

Contenido

1

Radiación térmica y el postulado de Planck 17

1-1 Introducción 19
1-2 Radiación térmica 19
1-3 Teoría clásica de la cavidad radiante 24
1-4 Teoría de Planck de la cavidad radiante 31
1-5 Aplicación de la ley de Planck de la radiación en termometría 38
1-6 El postulado de Planck y sus implicaciones 39
1-7 Breve historia del quantum 41

2

Fotones—Propiedades corpusculares de la radiación 45

2-1 Introducción 47
2-2 El efecto fotoeléctrico 47
2-3 Teoría cuántica de Einstein del efecto fotoeléctrico 50
2-4 El efecto Compton 55
2-5 Naturaleza dual de la radiación electromagnética 61
2-6 Fotones y emisión de rayos X 62
2-7 Producción y aniquilación de pares 65
2-8 Secciones transversales para absorción y dispersión de fotones 70

3

Postulado de de Broglie. Propiedades ondulatorias de las partículas 79

3-1 Ondas de materia 81
3-2 Dualidad onda-partícula 88
3-3 El principio de incertidumbre 91
3-4 Propiedades de las ondas de materia 95
3-5 Algunas consecuencias del principio de incertidumbre 105
3-6 Filosofía de la teoría cuántica 106

4

Modelo atómico de Bohr 113

4-1 Modelo de Thomson 115
4-2 Modelo de Rutherford 119
4-3 Estabilidad del átomo nuclear 126
4-4 Espectros atómicos 126
4-5 Postulados de Bohr 129
4-6 Modelo de Bohr 130
4-7 Corrección por masa nuclear finita 136
4-8 Estados de energía atómica 139
4-9 Interpretación de las reglas de cuantización 142
4-10 Modelo de Sommerfeld 146
4-11 El principio de correspondencia 149
4-12 Una crítica a la teoría cuántica antigua 151

5

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica 157

5-1 Introducción 159
5-2 Argumentos de plausibilidad que conducen a la ecuación de Schrödinger 162
5-3 Interpretación de Born de las funciones de onda 169
5-4 Valores de expectación 176
5-5 La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo 187
5-6 Propiedades requeridas para las eigenfunciones 192
5-7 Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger 194
5-8 Resumen 203

6

Soluciones a las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo 215

6-1 Introducción 217
6-2 El potencial cero 218
6-3 Potencial escalón (energía menor que la altura del escalón) 224
6-4 Potencial escalón (energía mayor que la altura del escalón) 234
6-5 La barrera de potencial 240
6-6 Ejemplos de penetración de barrera por partículas 247
6-7 Potencial de pozo cuadrado 251
6-8 Potencial de pozo cuadrado infinito 257
6-9 Potencial de oscilador armónico simple 265
6-10 Resumen 269

7

Atomos con un electrón 277

7-1 Introducción 279
7-2 Desarrollo de la ecuación de Schrödinger 280

-3 Separación de la ecuación independiente del tiempo 282
-4 Solución de las ecuaciones 284
-5 Eigenvalores, números cuánticos y degeneración 286
-6 Eigenfunciones 289
-7 Densidades de probabilidad 292
-8 Impulso angular orbital 303
-9 Ecuaciones de eigenvalores 308

8

Momentos magnéticos dipolares, spin y razones de transición 315

8-1 Introducción 317
8-2 Momentos magnéticos dipolares orbitales 317
8-3 Experimento de Stern-Gerlach y spín del electrón 322
8-4 Interacción spín-órbita 328
8-5 Momento angular total 331
8-6 Energía de interacción spín-órbita y niveles de energía del hidrógeno 335
8-7 Razones de transición y reglas de selección 340
8-8 Comparación entre las teorías cuánticas antigua y moderna 347

9

Atomos multielectrónicos-estados base y excitaciones de rayos X 353

9-1 Introducción 355
9-2 Partículas idénticas 356
9-3 El principio de exclusión 362
9-4 El átomo de helio y las fuerzas de intercambio 365
9-5 Teoría de Hartree 374
9-6 Resultados de la teoría de Hartree 378
9-7 Estados base de átomos multielectrónicos y la tabla periódica 385
9-8 Espectros de líneas de rayos X 393

10

Atomos multielectrónicos-excitaciones ópticas 405

10-1 Introducción 407
10-2 Atomos alcalinos 408
10-3 Atomos con varios electrones ópticamente activos 412
10-4 Acoplamiento *LS* 416
10-5 Niveles de energía del átomo de carbono 422
10-6 El efecto Zeeman 425
10-7 Resumen 432

11

Estadística cuántica 437

11-1 Introducción 439
11-2 Indistinguibilidad y estadística cuántica 440
11-3 Funciones de distribución cuánticas 444
11-4 Comparación de las funciones de distribución 447
11-5 Calor específico de un sólido cristalino 452
11-6 La distribución de Boltzmann como una aproximación a las distribuciones cuánticas 456
11-7 El laser 457
11-8 Gas de fotones 463
11-9 Gas de fonones 464
11-10 Condensación de Bose y Helio líquido 465
11-11 El gas de electrones libres 471
11-12 Potencial de contacto y emisión termiónica 474
11-13 Descripciones clásica y cuántica del estado de un sistema 476

12

Moléculas 483

12-1 Introducción 485
12-2 Enlaces iónicos 485
12-3 Enlaces covalentes 488
12-4 Espectros moleculares 492
12-5 Espectros rotacionales 493
12-6 Espectros vibro-rotacionales 496
12-7 Espectros electrónicos 500
12-8 El efecto Raman 503
12-9 Determinación del spin nuclear y características de simetría 504

13

Sólidos—Conductores y semiconductores 513

13-1 Introducción 515
13-2 Tipos de sólidos 515
13-3 Teoría de bandas de los sólidos 517
13-4 Conducción eléctrica en metales 522
13-5 Modelo cuántico del electrón libre 524
13-6 Movimiento de electrones en una red periódica 530
13-7 Masa efectiva 534
13-8 Semiconductores 538
13-9 Dispositivos semiconductores 544

14

Sólidos—Superconductores y propiedades magnéticas **555**

14-1 Superconductividad 557
14-2 Propiedades magnéticas de sólidos 566
14-3 Paramagnetismo 567
14-4 Ferromagnetismo 571
14-5 Antiferromagnetismo y ferrimagnetismo 577

15

Modelos nucleares **583**

15-1 Introducción 585
15-2 Generalidades sobre algunas propiedades nucleares 587
15-3 Dimensiones y densidades nucleares 591
15-4 Masas nucleares y sus abundancias 595
15-5 Modelo de gota 604
15-6 Números mágicos 607
15-7 Modelo del gas de Fermi 609
15-8 Modelo de capas 612
15-9 Predicciones del modelo de capas 618
15-10 Modelo colectivo 622
15-11 Resumen 628

16

Decaimiento nuclear y reacciones nucleares **633**

16-1 Introducción 635
16-2 Decaimiento Alfa 635
16-3 Decaimiento Beta 642
16-4 Interacción por decaimiento Beta 653
16-5 Decaimiento Gamma 660
16-6 El efecto Mössbauer 666
16-7 Reacciones nucleares 669
16-8 Estados excitados de los núcleos 679
16-9 Fisión y reactores 683
16-10 Fusión y origen de los elementos 688

17

Partículas elementales **699**

17-1 Introducción 701
17-2 Fuerzas nucleónicas 701
17-3 Isospín 715
17-4 Piones 717
17-5 Muones 725
17-6 Extrañeza 727

17-7 Interacciones fundamentales y leyes de conservación 732
17-8 Familias de partículas elementales 736
17-9 Hipercarga y Cuarks 739

Apéndice **A**
Teoría especial de la relatividad **749**

Apéndice **B**
Radiación de una carga acelerada **769**

Apéndice **C**
Distribución de Boltzmann **773**

Apéndice **D**
Trayectorias en la dispersión de Rutherford **781**

Apéndice **E**
Cantidades complejas **785**

Apéndice **F**
Solución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de pozo cuadrado **789**

Apéndice **G**
Solución analítica de la ecuación de Schrödinger independiente el tiempo para un potencial de pozo cuadrado **795**

Apéndice **H**
Solución en serie de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de oscilador armónico simple **801**

Apéndice **I**
El laplaciano y los operadores de impulso angular en coordenadas polares esféricas **807**

Apéndice **J**
La precesión de Thomas **811**

Apéndice **K**
El principio de exclusión en el acoplamiento *LS* **815**

Apéndice **L**
Referencias **819**

Apéndice **M**
Respuestas a problemas seleccionados **821**

Apéndice **N**
Constantes usuales y factores de conversión **823**

Indice **825**

física cuántica

ÁTOMOS, MOLÉCULAS, SÓLIDOS, NUCLEOS Y PARTICULAS

1

Radiación térmica y el postulado de Planck

1.1 Introducción 19

Teoría cuántica antigua; relación entre la física cuántica y la clásica; papel de la constante de Planck.

1.2 Radiación térmica 19

Propiedades de la radiación térmica, cuerpos negros; radiancia espectral; funciones de distribución; radiancia; ley de Stefan; constante de Stefan-Boltzmann; ley de Wien; radiación por una cavidad; densidad de energía; ley de Kirchhoff.

1.3 Teoría clásica de la cavidad radiante 24

Ondas electromagnéticas en una cavidad; ondas estacionarias; conteo de las frecuencias permitidas; equipartición de la energía; constante de Boltzmann; espectro de Rayleigh-Jeans.

1.4 Teoría de Planck de la cavidad radiante 31

Distribución de Boltzmann; energías discretas; violación de la equipartición; constante de Planck; espectro de Planck.

1.5 Aplicación de la ley de radiación de Planck en termometría 38

Pirómetros ópticos; radiación universal a 3°K y la "gran explosión".

1.6 El postulado de Planck y sus implicaciones 39

Definición general del postulado; energías cuantizadas; estados cuánticos; números cuánticos; péndulo macroscópico.

1.7 Breve historia del quantum 41

Trabajo inicial de Planck; intentos de reconciliar la cuantización con la física clásica.

Preguntas 41

Problemas 43

1

Radiación térmica y el postulado de Planck

1.1 Introducción

En una reunión de la Sociedad Alemana de Física, el 14 de diciembre de 1900, Max Planck leyó un trabajo intitulado "La teoría de la ley de distribución de energías del espectro normal". Este trabajo que en un principio atrajo poca atención, fue el precursor de una revolución en la física. La fecha de su presentación se considera como el nacimiento de la física cuántica, a pesar de que fue hasta un cuarto de siglo después, cuando Schrödinger y otros desarrollaron la mecánica cuántica moderna, base del conocimiento actual. Fueron muchos los caminos que convergieron en este conocimiento, cada uno de los cuales mostró distintos aspectos de las fallas de la física clásica. En éste y los siguientes capítulos se examinarán los logros más importantes de la que hoy se llama *teoría cuántica antigua* y que dio origen a la mecánica cuántica moderna. Los fenómenos experimentales que se analizarán en relación con la teoría cuántica antigua, comprenden todas las disciplinas de la física clásica: mecánica, termodinámica, mecánica estadística y electromagnetismo. La necesidad de una mecánica cuántica, se manifestará por la contradicción sistemática de las leyes clásicas respecto a dichos fenómenos y la solución a esos conflictos en base a ideas cuánticas. El estudio de la teoría cuántica antigua permitirá obtener, más fácilmente, un conocimiento más profundo de la mecánica cuántica cuando se inicie su consideración en el quinto capítulo.

Como en el caso de la relatividad (que se trata brevemente en el apéndice A), la física cuántica representa una generalización de la física clásica, que incluye a las leyes clásicas como casos particulares. Así como la relatividad extiende el campo de aplicación de las leyes de la física a la región de altas velocidades, la física cuántica lo extiende a la región de dimensiones pequeñas; y así como la relatividad se caracteriza por una constante universal de significado fundamental, la velocidad de la luz c, así mismo la física cuántica se caracteriza por una constante universal de significado fundamental, que hoy se llama constante de Planck h. En su trabajo de 1900, Planck introdujo esta constante para tratar de explicar las propiedades observadas en la radiación térmica. De esta manera se empezará el estudio de la radiación térmica, que conducirá a la constante de Planck y, relacionada con ésta, al concepto cuántico de energía discreta. También se verá que la radiación térmica en sí, es de gran importancia y actualidad, ya que, por ejemplo, este fenómeno ha ayudado recientemente a los astrofísicos a decidir entre varias teorías acerca del origen del universo.

1.2 Radiación térmica

Se llama *radiación térmica*, a la radiación emitida por un cuerpo como consecuencia de su temperatura. Todos los cuerpos emiten esta radiación a su derredor, y la absorben de él. Si, en

un principio, el cuerpo está más caliente que su alrededor, se enfriará, ya que la rapidez con que emite energía excederá la rapidez con que la absorbe. Cuando se alcanza el equilibrio térmico la rapidez de emisión y la de absorción de energía serán iguales. La materia en un estado condensado (es decir, sólido o líquido) emite un espectro de radiación continuo. Los detalles del espectro son casi independientes del material particular del cual se compone el cuerpo, pero dependen fuertemente de la temperatura. A temperaturas ordinarias, la mayoría de los cuerpos son visibles no por la luz que emiten sino por la luz que reflejan, ya que si no se hace incidir luz sobre ellos no es posible verlos. Sin embargo, a muy altas temperaturas, los cuerpos son luminosos por sí mismos. En un cuarto obscuro se les puede ver brillar; pero aún a temperaturas de varios miles de grados Kelvin, más del 90% de la radiación térmica emitida es invisible para nosotros, empezando por la parte correspondiente al infrarrojo del espectro electromagnético. Por lo tanto, los cuerpos luminosos por sí mismos están muy calientes.

Por ejemplo, considere el calentamiento en el fuego, de una barra de hierro a temperaturas cada vez más altas, retirando en forma periódica la barra del fuego, el tiempo suficiente para observar sus propiedades. Cuando la barra aún está a temperaturas relativamente bajas, radía calor pero no está visiblemente caliente; conforme aumenta la temperatura, la cantidad de radiación emitida por la barra aumenta muy rápidamente y empiezan a notarse efectos visibles. La barra empieza a verse de un color rojo opaco, después adquiere un color rojo brillante y, a muy altas temperaturas, un intenso color blanco azuloso. Es decir, a medida que aumenta la temperatura, el cuerpo emite más radiación térmica y la frecuencia de la radiación más intensa se vuelve cada vez mayor.

La relación que existe entre la temperatura de un cuerpo y el espectro de frecuencias de la radiación emitida, se utiliza en un dispositivo llamado pirómetro óptico. Este dispositivo es esencialmente un espectrómetro rudimentario que permite al operador estimar la temperatura de un cuerpo caliente, como una estrella, observando el color o la composición de frecuencias de la radiación térmica que emite. Existe un espectro continuo de radiación emitida, pero el ojo humano ve principalmente el color correspondiente a la emisión más intensa en la región visible. El sol, los filamentos de focos y carbones calientes, son ejemplos comunes de objetos que emiten radiación visible.

En términos generales, la forma detallada del espectro de radiación térmica emitida por un cuerpo caliente, depende de la composición del mismo. Sin embargo, experimentalmente se encuentra que solo hay una clase de cuerpos que emiten espectros térmicos de características universales. Estos son los llamados *cuerpos negros*, es decir, cuerpos cuyas superficies absorben toda la radiación térmica que incide sobre ellos. El nombre resulta apropiado puesto que dichos cuerpos no reflejan luz y, por tanto, se ven negros. Un ejemplo de un (casi) cuerpo negro, sería *cualquier* objeto cubierto con una capa difusa de pigmento negro, como negro-bismuto o negro-humo. Más adelante se describió otro ejemplo bastante diferente. Independientemente de los detalles de su composición, *todos* los cuerpos negros a la misma temperatura emiten radiación térmica con el mismo espectro. Este hecho general se puede entender en base a argumentos clásicos que implican el equilibrio termodinámico. Sin embargo, la forma específica del espectro no puede obtenerse solamente de argumentos termodinámicos. Las propiedades universales de la radiación emitida por cuerpos negros los hacen objeto de un interés teórico especial y los físicos siempre trataron de encontrar una explicación a las características específicas de su espectro.

La distribución espectral de la radiación de un cuerpo negro se especifica por la cantidad $R_T(\nu)$, llamada *radiancia espectral*, definida tal que $R_T(\nu)\,d\nu$ es igual a la energía emitida en forma de radiación con frecuencias en el intervalo entre ν y $\nu + d\nu$ de un área unitaria de la superficie a temperatura absoluta T y por unidad de tiempo. En 1899, Lummer y Pringsheim realizaron una de las primeras mediciones precisas de esta cantidad. Utilizaron un instrumento esencialmente similar a los espectrómetros de prisma utilizados para medir espectros ópticos, excepto que para los prismas, lentes, etc, se utilizaron materiales especiales, de manera que

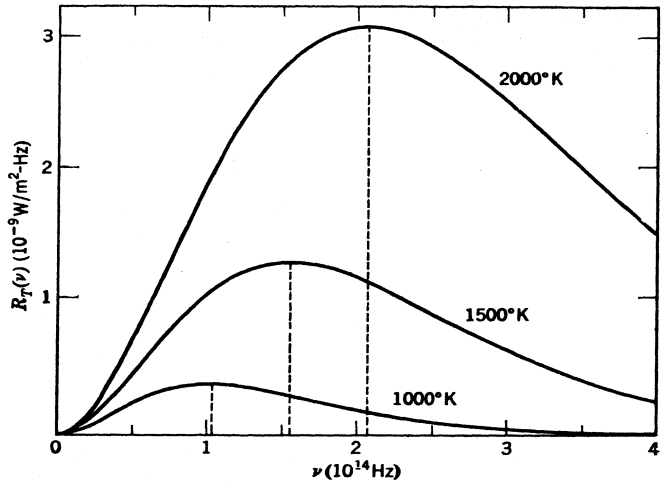


FIGURA 1-1

Radiancia espectral de un cuerpo negro radiante como función de la frecuencia de radiación, para temperaturas de 1000°K y 2000°K del cuerpo radiante. Obsérvese que la frecuencia a la que ocurre la máxima radiancia (línea punteada), aumenta linealmente conforme la temperatura aumenta y que la potencia total emitida, por metro cuadrado del cuerpo radiante (área bajo la curva), aumenta muy rápidamente con la temperatura.

fueran transparentes a la radiación térmica de frecuencia relativamente baja. En la figura 1-1 se indica la dependencia de $R_T(\nu)$ con T y ν que se observa en los experimentos.

Las *funciones de distribución*, de las cuales es un ejemplo, la radiancia espectral son muy comunes en física. Así por ejemplo, la función de distribución de velocidades de Maxwell (que se parece a una de las curvas de la figura 1-1) nos dice cómo se distribuyen las moléculas de un gas a presión y temperatura fijas, de acuerdo con su velocidad. Otra función de distribución, que probablemente el estudiante ha visto, es la que especifica el tiempo de decaimiento de núcleos radiactivos (que tiene la forma de una exponencial decreciente) en una muestra que contiene núcleos de una especie dada, y desde luego habrá visto la función de distribución correspondiente a las calificaciones obtenidas en un examen de física.

La función de distribución para la radiancia espectral de un cuerpo negro de área dada y a una temperatura particular, sea 1000°K de la figura 1-1, muestra que: (1) la potencia emitida por un intervalo de frecuencias pequeño $d\nu$, es pequeña si ese intervalo se encuentra a una frecuencia ν muy pequeña comparada con 10^{14} Hz. La potencia es cero para ν igual a cero. (2) La potencia radiada en el intervalo $d\nu$ aumenta rápidamente a medida que ν aumenta, partiendo de valores muy pequeños. (3) Alcanza un máximo para un valor de $\nu \simeq 1.1 \times 10^{14}$ Hz. Es decir, la potencia radiada con mayor intensidad, ocurre a esa frecuencia. (4) Por arriba de $\simeq 1.1 \times 10^{14}$ Hz, la potencia radiada disminuye lenta pero continuamente conforme ν aumenta. Se vuelve cero una vez más, cuando ν tiende a valores infinitamente grandes.

Las dos funciones de distribución, correspondientes a las temperaturas de 1500°K y 2000°K, que aparecen en la figura, muestran que; (5) la frecuencia para la cual la potencia radiada ocurre con mayor intensidad, aumenta, conforme la temperatura aumenta. Por inspección de la figura se puede verificar que esta frecuencia aumenta linealmente con la temperatura. (6) La potencia total radiada, en todas las frecuencias, aumenta conforme la temperatura aumenta, pero más rápidamente que en forma lineal. La potencia total radiada a una temperatura particular, se obtiene sencillamente del área bajo la curva correspondiente a esa temperatura, $\int_0^\infty R_T(\nu)\, d\nu$, ya que $R_T(\nu)d\nu$ es la potencia radiada en el intervalo de frecuencias comprendido entre ν y $\nu + d\nu$.

La integral de la radiancia espectral $R_T(\nu)$ sobre toda ν, es la energía total emitida de un cuerpo negro a temperatura T, por unidad de tiempo y por unidad de área. Se le llama la *radiancia* R_T, es decir,

$$R_T = \int_0 R_T(\nu)\, d\nu \tag{1-1}$$

Como se mencionó en el estudio relacionado con la figura 1-1, R_T aumentaría rápidamente a medida que la temperatura aumenta. El resultado se conoce como ley de Stefan, y fue enunciada por primera vez en 1879, en forma de una ecuación empírica:

$$R_T = \sigma T^4 \tag{1-2}$$

donde

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8}\ \mathrm{W/m^2\text{–}{}^\circ K^4}$$

es llamada *constante de Stefan-Boltzmann.* En la figura 1-1 también se muestra que el espectro se desplaza hacia frecuencias mayores a medida que T aumenta. Este resultado se conoce como *ley del desplazamiento de Wien:*

$$\nu_{\max} \propto T \tag{1-3a}$$

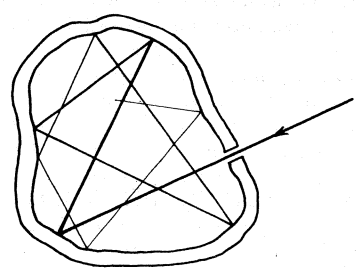
donde $\nu_{\max}$ es la frecuencia para la cual $R_T(\nu)$ alcanza su valor máximo para una T particular. A medida que T aumenta, $\nu_{\max}$ se desplaza hacia frecuencias mayores. Todos estos resultados concuerdan con las experiencias ya conocidas que se analizaron anteriormente, a saber; que la radiación térmica emitida aumenta rápidamente con la temperatura, (la barra de fierro radía mucha más energía térmica a temperaturas más altas), y la frecuencia principal de la radiación también aumenta, conforme la temperatura aumenta (la barra cambia de color, de rojo opaco a blanco azuloso).

Otro ejemplo de un cuerpo negro, que como se verá resulta particularmente importante, consiste en un objeto que contiene una cavidad y que se comunica con el exterior por medio de un pequeño agujero como se muestra en la figura 1-2. La radiación del exterior que incide sobre el agujero, penetra en la cavidad y se refleja hacia todos sentidos en las paredes de la cavidad, de modo que eventualmente se absorbe en estas paredes. Si el área del agujero es muy pequeña, comparada con el área de la superficie interna de la cavidad, la radiación reflejada hacia el exterior a través del agujero será despreciable. Esencialmente, toda la radiación que incide sobre el agujero será absorbida, por lo tanto, el *agujero* tendrá todas las propiedades de la superficie de un cuerpo negro. La mayoría de los cuerpos negros que se utilizan en los experimentos de laboratorio, se construyen a lo largo de estas líneas.

Supóngase que las paredes de la cavidad se calientan a una temperatura T, de modo que

FIGURA 1-2

Cavidad en un cuerpo comunicada con el exterior por medio de un pequeño agujero. La radiación incidente sobre el agujero es absorbida completamente después de reflexiones sucesivas en las paredes internas de la cavidad. El agujero absorbe radiación como un cuerpo negro. En el proceso inverso, por medio del cual la radiación que sale por el agujero se constituye por contribuciones emitidas de la superficie interna, el agujero emite radiación como un cuerpo negro.



emitirán radiación térmica que llenará la cavidad. Una pequeña fracción de esta radiación, que incida en el agujero, pasará por él, y así el agujero actuará como emisor de radiación térmica. Como el agujero debe tener las propiedades de la superficie de un cuerpo negro, la radiación que emite debe tener el espectro de un cuerpo negro; sin embargo, como el agujero simplemente muestrea la radiación térmica dentro de la cavidad, resulta evidente que la radiación en la cavidad también debe tener un espectro de cuerpo negro. De hecho, debe tener un espectro de cuerpo negro característico de la temperatura T en las paredes, ya que ésta es la única temperatura que se define en el sistema. El espectro emitido por el agujero en la cavidad, se especifica en términos del flujo de energía $R_T(\nu)$. Sin embargo, resulta más útil especificar el espectro de la radiación dentro de la cavidad, llamada *radiación de la cavidad*, en términos de una *densidad de energía*, $\rho_T(\nu)$, que se define como la energía contenida en una unidad de volumen de la cavidad a temperatura T, en el intervalo de frecuencia entre ν y $\nu + d\nu$. Es evidente que estas cantidades deben ser proporcionales entre sí, es decir,

$$\rho_T(\nu) \propto R_T(\nu) \tag{1-4}$$

Por lo tanto, la radiación dentro de una cavidad cuyas paredes están a temperatura T, tiene el mismo carácter que la radiación emitida por la superficie de un cuerpo negro a temperatura T. Experimentalmente, resulta conveniente producir un espectro de cuerpo negro, por medio de una cavidad en un cuerpo caliente con un agujero hacia el exterior, y teóricamente también es conveniente estudiar la radiación de un cuerpo negro, analizando la radiación de una cavidad, ya que es posible aplicar argumentos muy generales para predecir las propiedades de la radiación de una cavidad.

Ejemplo 1-1. (a) Ya que $\nu = c$, la velocidad constante de la luz, la ley del desplazamiento de Wien (1-3a), también se puede escribir como:

$$\lambda_{máx} T = \text{constante} \tag{1-3b}$$

donde $\lambda_{máx}$ es la longitud de onda para la cual, a una temperatura T particular, la radiancia espectral alcanza su valor máximo. El valor determinado experimentalmente para la constante de Wien es 2.898×10^{-3} m-°K. Si se supone que las superficies de las estrellas se comportan como cuerpos negros, se puede obtener una buena estimación de su temperatura, midiendo $\lambda_{máx}$. Para el sol, $\lambda_{máx} = 5100$ Å, mientras que para la estrella polar $\lambda_{máx} = 3500$ Å. Encuentre la temperatura de la superficie de estas estrellas. (Un *angstrom* $= 1$ Å $= 10^{-10}$ m.)

Para el sol, $T = 2.898 \times 10^{-3}$ m-°K%5100×10^{-10} m $= 5700$°K. Para la estrella polar, $T = 2.898 \times 10^{-3}$ m-m-°K3500×10^{-10} m $= 8300$°K.

A 5700°K, la superficie del sol está a una temperatura muy cercana a la necesaria para que la mayor parte de su radiación esté en la región visible del espectro. Lo anterior sugiere que durante las etapas de la evolución humana, nuestros ojos se han adaptado al sol, haciéndose más sensibles a aquellas longitudes de onda que emite con mayor intensidad.

b) Utilizando la ley de Stefan, (1-2), y las temperaturas recién obtenidas; determinar la potencia radiada por 1 cm² de superficie estelar.

Para el sol.

$$R_T = \sigma T^4 = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{-°K}^4 \times (5700\text{°K})^4$$
$$= 5.90 \times 10^7 \text{ W/m}^2 \simeq 6000 \text{ W/cm}^2$$

Para la estrella polar.

$$R_T = \sigma T^4 = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{-°K}^4 \times (8300\text{°K})^4$$
$$= 2.71 \times 10^8 \text{ W/m}^2 \simeq 27{,}000 \text{ W/cm}^2$$ ◀

Ejemplo 1-2. Suponga que se tienen dos cuerpos opacos, separados por una distancia grande y colgados de hilos finos en una cámara evacuada cuyas paredes se mantienen a temperatura constante. En tales condiciones, los cuerpos y las paredes intercambian calor sólo por medio de radiación. Sea e la razón de emisión de energía radiante de un cuerpo y sea a la razón de absorción de energía radiante del cuerpo. Demuestre que en equilibrio

$$\frac{e_1}{a_1} = \frac{e_2}{a_2} = 1 \tag{1-5}$$

Esta relación, (1-5), se conoce como *ley de radiación de Kirchhoff*. En todo el sistema dentro de la cámara y en tal estado, la razón de emisión necesariamente es igual a la razón de absorción para cada cuerpo. Entonces:

$$e_1 = a_1 \quad \text{y} \quad e_2 = a_2$$

Por lo tanto,

$$\frac{e_1}{a_1} = 1 = \frac{e_2}{a_2}$$

Si uno de los cuerpos, por ejemplo el cuerpo 2, es un cuerpo negro, entonces $a_2 > a_1$, ya que un cuerpo negro es más absorbente que uno que no es cuerpo negro. Por lo tanto, de (1-5) se sigue que $e_2 > e_1$. Así pues, el hecho observado de que cuerpos que son más absorbentes también son buenos emisores, se predice por la ley de Kirchhoff. ◀

1.3 Teoría clásica de la cavidad radiante

A principios del presente siglo, Rayleigh y también Jeans, hicieron cálculos de la densidad de energía de la radiación por una cavidad (o cuerpo negro), que señalaban hacia un serio conflicto entre la física clásica y los resultados experimentales. Este cálculo es similar a los que resultaron de considerar muchos otros fenómenos (es decir, el calor específico de los sólidos) que serán tratados más adelante. Los detalles serán presentados aquí, pero primero se describirán los procedimientos generales que servirán como guía en los cálculos.

Considérese que a una cavidad con paredes metálicas se la calienta uniformemente a una temperatura T. Las paredes emiten radiación electromagnética en el intervalo térmico de frecuencias. Se sabe que esto ocurre, básicamente, por el movimiento acelerado de los electrones en las paredes, que resulta de la agitación térmica (véase el apéndice B). Sin embargo, no es necesario estudiar en detalle el comportamiento de las ondas electromagnéticas en el interior de la cavidad. Rayleigh y Jeans procedieron en la forma siguiente. En primer lugar, se utiliza la teoría electromagnética clásica para demostrar que la radiación en el interior de la cavidad debe existir en forma de ondas estacionarias con nodos en las superficies metálicas. Utilizando argumentos geométricos, se cuenta el número de dichas ondas estacionarias en el intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$, con el fin de determinar cómo depende ese número de ν. Después, se utiliza un resultado de la teoría cinética para calcular la energía total promedio de estas ondas cuando el sistema está en equilibrio térmico. En la teoría clásica, la energía total promedio sólo depende de la temperatura T. El número de ondas estacionarias en el intervalo de frecuencias, multiplicado por la energía promedio de las ondas y dividido entre el volumen de la cavidad, proporciona el contenido de energía promedio por unidad de volumen en el intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$, y esta es la cantidad que se buscaba: la densidad de energía $\rho_T(\nu)$. Ahora, haga todo esto.

Por simplicidad, supóngase que la cavidad de paredes metálicas llena con radiación electromagnética tiene la forma de un cubo de lado a, como se muestra en la figura 1-3. En ese caso, la radiación que se refleja de las paredes puede ser analizada en términos de tres componentes a lo

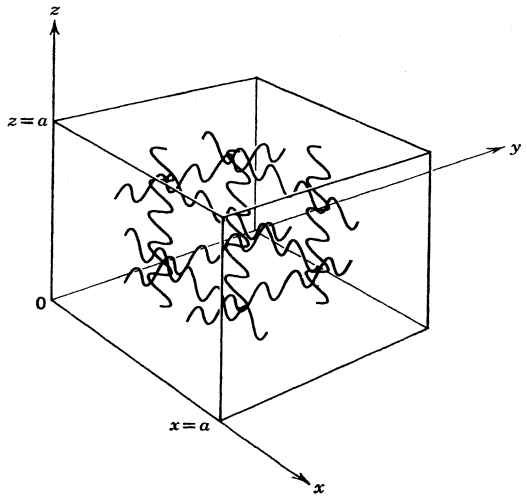


FIGURA 1-3

Cavidad con paredes metálicas llena con radiación electrómagnética, mostrando las tres componentes de la radiación sin interferirse, que rebotan de las paredes y que forman ondas estacionarias con nodos en cada pared.

largo de las tres direcciones mutuamente perpendiculares que definen los lados de la cavidad. Como las paredes opuestas son paralelas entre sí, las tres componentes de la radiación no se mezclan y se pueden tratar por separado. Considérese la componente x en la pared metálica en $x = 0$. Toda la radiación que incide sobre esta pared es reflejada y las ondas incidentes y reflejadas se combinan para formar una onda estacionaria. Ahora bien, como la radiación electromagnética es una vibración trasversal con el vector de campo eléctrico **E** perpendicular a la dirección de propagación, y como la dirección de propagación para este componente es perpendicular a la pared en cuestión, el vector de campo eléctrico **E** es paralelo a la pared. Sin embargo, una pared metálica no es compatible con un campo eléctrico paralelo a su superficie, ya que siempre se puede establecer un flujo de cargas de modo tal que se neutralice el campo. Por lo tanto para esta componente, **E** siempre es cero en la pared. Es decir, la onda estacionaria **asociada con la componente x de la radiación, debe tener un nodo (amplitud cero) en $x = 0$. La** onda estacionaria también deberá tener un nodo en $x = a$, ya que no puede haber un campo eléctrico paralelo en la pared correspondiente. Además, se aplican condiciones similares a las otras dos componentes; la onda estacionaria asociada con la componente y deberá tener nodos en $y = 0$ y $y = a$, y la onda estacionaria asociada con la componente z, deberá tener nodos en $z = 0$ y $z = a$. Estas condiciones imponen limitaciones en las longitudes de onda posibles y por lo tanto, en las frecuencias posibles de la radiación electromagnética en la cavidad.

Ahora se considerará el problema de contar el número de ondas estacionarias con nodos en las superficies de la cavidad, cuyas longitudes de onda se encuentran en el intervalo entre λ y $\lambda + d\lambda$, correspondiente al intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$. Primero se tratará la componente x, solamente para fijar la atención en las ideas contenidas en este cálculo; es decir, se tratará el caso simplificado, aunque artificial, de una "cavidad unidimensional" de longitud a. Al desarrollar este caso, se verá que la generalización al caso real tridimensional es obvio.

El campo eléctrico para una onda estacionaria unidimensional puede describirse matemáticamente por la función

$$E(x, t) = E_0 \operatorname{sen}(2\pi x/\lambda) \operatorname{sen}(2\pi\nu t) \tag{1-6}$$

donde λ es la longitud de onda, ν la frecuencia y E_0 la amplitud máxima de la onda. Las dos primeras cantidades se relacionan entre sí por medio de la ecuación

$$\nu = c/\lambda \tag{1-7}$$

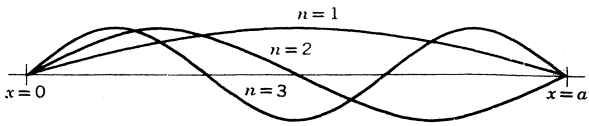


FIGURA 1-4

Patrones de amplitud para ondas estacionarias en una cavidad unidimensional con paredes en $x = 0$ y $x = a$, para los tres primeros valores del índice n.

donde c es la velocidad de propagación de las ondas electromagnéticas. La ecuacion (1-6) representa una onda cuya amplitud varía en el espacio como sen $(2\pi x/\lambda)$ y que oscila en el tiempo con frecuencia ν como un oscilador armónico simple. Puesto que obviamente, la amplitud será igual a cero en todo tiempo para las posiciones que satisfagan la relación

$$2x/\lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad (1\text{-}8)$$

la onda tendrá nodos fijos en ellas, esto es, es una onda estacionaria. Para poder satisfacer el requisito de que las ondas tengan nodos en los extremos de la cavidad unidimensional se escoge el origen del eje x en uno de los extremos de la cavidad $(x = 0)$ y se exige que en el otro extremo $(x = a)$

$$2x/\lambda = n \qquad \text{para } x = a \qquad (1\text{-}9)$$

donde

$$n = 1, 2, 3, 4, \ldots$$

Esta condición determina el conjunto de valores permitidos de la longitud de onda. Para estos valores permitidos, las amplitudes de las ondas estacionarias siguen un patrón cuya apariencia se muestra en la figura 1-4. Estos patrones se pueden reconocer como los correspondientes a ondas estacionarias producidas por las vibraciones de una cuerda sujeta en sus extremos, sistema físico real que también satisface (1-6). En nuestro caso, el patrón representa ondas electromagnéticas estacionarias.

Por conveniencia, la discusión se continúa en términos de frecuencias permitidas en lugar de longitudes de onda permitidas. Estas frecuencias son $\nu = c/\lambda$, donde $2a/\lambda = n$. Es decir,

$$\nu = cn/2a \qquad n = 1, 2, 3, 4, \ldots \qquad (1\text{-}10)$$

Estos valores permitidos de la frecuencia pueden representarse por un diagrama que consiste de un eje sobre el cual se señalan puntos correspondientes a cada valor entero de n. En dicho diagrama, el valor permitido de la frecuencia ν, correspondiente a un valor particular de n, de acuerdo con (1-10), es igual a $c/2a$ veces la distancia d del origen al punto respectivo, o también, la distancia d es $2a/c$ veces la frecuencia ν. Estas relaciones se muestran en la figura 1-5. Dichos diagramas resultan útiles en el cálculo del número de valores permitidos de la frecuencia ν en el intervalo de ν a $\nu + d\nu$, que se denota por $N(\nu)\, d\nu$. Para evaluar esta cantidad, simplemente se cuenta el número de puntos sobre el eje n que se encuentran entre dos límites que se construyen de manera tal que correspondan a las frecuencias ν y $\nu + d\nu$, respectivamente, como los puntos se distribuyen uniformemente en el eje n, aparentemente el número de puntos comprendidos entre estos dos límites será proporcional a $d\nu$ pero no dependerá de ν. En realidad, fácilmente se ve que $N(\nu)\, d\nu = (2a/c)\, d\nu$. Sin embargo, lo anterior debe multiplicarse por un factor de 2, ya que, para cada frecuencia permitida, existen en realidad dos ondas independientes correspon-

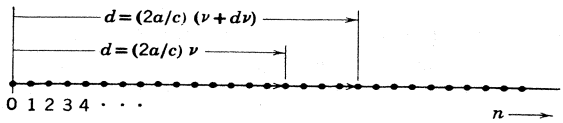


FIGURA 1-5

Valores permitidos del índice n, que determina los valores permitidos de la frecuencia, en una cavidad unidimensional de longitud a.

dientes a los dos estados de polarización posibles de las ondas electromagnéticas. Por lo tanto, se tiene que

$$N(\nu)\, d\nu = \frac{4a}{c}\, d\nu \tag{1-11}$$

De esta manera se completa el cálculo del número de ondas estacionarias permitidas para el caso artificial de una cavidad unidimensional.

El cálculo anterior hace evidente los procedimientos para extender el cálculo al caso real de una cavidad tridimensional. Esta extensión se indica en la figura 1-6. En este caso, el conjunto de puntos uniformemente distribuidos en valores enteros a lo largo del eje n, se sustituye por un **arreglo tridimensional uniforme de puntos cuyas tres coordenadas corresponden a valores enteros a lo largo de tres ejes n mutuamente perpendiculares. *Cada punto* del arreglo corresponde a una** onda estacionaria tridimensional particular permitida. El número de nodos de las componentes **x, y, z de la onda estacionaria, se obtienen de los valores enteros** n_x, y n_y, **equivale a analizar** una onda tridimensional (es decir, que se propaga en una dirección arbitraria) en tres componentes tridimensionales. En este caso, el número de frecuencias permitidas en el intervalo de frecuencia de ν a $\nu = d\nu$ es igual al número de puntos contenidos entre dos cascarones esféricos con radios correspondientes a las frecuencias ν y $\nu + d\nu$ respectivamente.

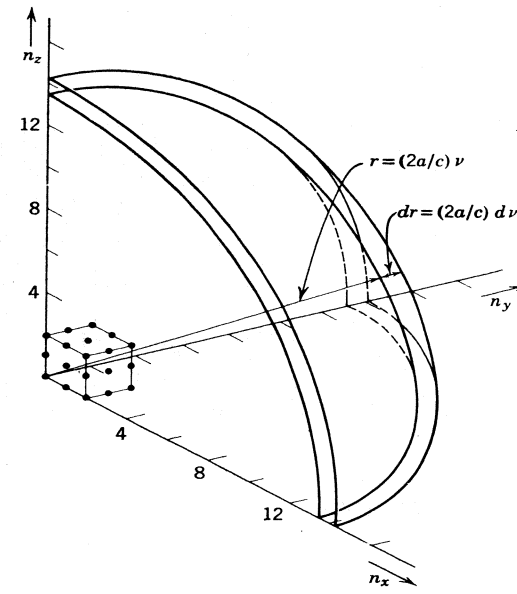


FIGURA 1-6

Los valores permitidos de la frecuencia en una cavidad tridimensional cúbica de lado a, se determinan por tres índices n_x, n_y, n_z que sólo pueden tomar valores enteros. Para mayor claridad, se muestran sólo unos cuantos de los muchos puntos correspondientes a conjuntos de estos tres índices.

Como $N(r)\,dr$ es igual al volumen comprendido entre los cascarones por la densidad de puntos de la red, y como, por construcción, la densidad es uno, $N(r)\,dr$ es simplemente,

$$N(r)\,dr = \frac{1}{8}\,4\pi r^2\,dr = \frac{\pi r^2\,dr}{2} \tag{1-15}$$

Igualando lo anterior a $N(\nu)\,d\nu$, y evaluando $r^2\,dr$ de (1-14b), se tiene

$$N(\nu)\,d\nu = \frac{\pi}{2}\left(\frac{2a}{c}\right)^3 \nu^2\,d\nu$$

Para completar el cálculo, estos resultados se deben multiplicar por un factor de 2, ya que, para cada una de las frecuencias permitidas que se han enumerado, existen en realidad dos ondas independientes correspondientes a los dos estados de polarización posibles de la radiación electromagnética. Por lo tanto, se ha derivado (1-12). Se puede demostrar que $N(\nu)$ es independiente de la forma de la cavidad y sólo depende de su volumen. ◀

Obsérvese que existe una diferencia significativa entre los resultados obtenidos para el caso real de una cavidad tridimensional y los resultados obtenidos antes para el caso artificial de una cavidad unidimensional. El factor ν^2 que se encuentra en (1-12) pero no en (1-11), jugará un papel muy importante, como se verá, en los argumentos siguientes. Básicamente, este factor resulta del hecho de que vivimos en un mundo tridimensional siendo la potencia de ν uno menos que la dimensionalidad. Aunque Planck, al resolver finalmente las serias discrepancias entre la teoría clásica y el experimento, puso en tela de juicio algunos puntos que habían sido considerados obviamente ciertos, ni él ni otros trabajando sobre el problema dudaron de (1-12). Existió y aún persiste un acuerdo general de que (1-12) es válida.

Ahora ya se puede contar el número de ondas estacionarias. El paso siguiente en la teoría clásica de Rayleigh-Jeans para la radiación de un cuerpo negro, es el cálculo de la energía total promedio contenida en cada onda estacionaria de frecuencia ν. De acuerdo con la física clásica, la energía de alguna onda particular puede tener cualquier valor entre cero e infinito y su valor real debe ser proporcional al cuadrado de su amplitud constante E_0. Sin embargo, para un sistema que contenga un número grande de entes físicos del mismo tipo, los cuales están en equilibrio térmico a una temperatura T, la física clásica hace una predicción bastante definitiva acerca de los valores *promedio* de las energías de los entes. Esto puede aplicar en este caso, puesto que la multitud de ondas estacionarias, que constituyen la radiación térmica dentro de la cavidad, son entes del mismo tipo que están en equilibrio térmico entre sí, a la temperatura T de las paredes de la cavidad. El equilibrio térmico se asegura por el hecho de que las paredes de una cavidad real siempre absorberán y rerradiarán, con diferentes frecuencias y direcciones, una pequeña parte de la radiación que incide sobre ellas, y consecuentemente, las diferentes ondas estacionarias en forma gradual, podrán intercambiar energía como se requiere para mantener el equilibrio.

La predicción viene de la teoría cinética clásica, y es llamada *ley de equipartición de la energía*. Esta ley afirma que para un sistema de moléculas de un gas, en equilibrio térmico a una temperatura T, la energía cinética promedio de una molécula, por grado de libertad, es $kT/2$, donde $k = 1.38 \times 10^{-23}$ joule^{0}K se le llama *constante de Boltzmann*. Esta ley se aplica a cualquier sistema clásico que contenga, en equilibrio, un número grande de entes del mismo tipo. Para el caso que nos ocupa, los entes son ondas estacionarias que tienen como único grado de libertad, las amplitudes de sus campos eléctricos. Por lo tanto, sus energías cinéticas, en promedio, tendrán el mismo valor, $kT/2$. Sin embargo, cada onda estacionaria oscilante senoidal tiene una energía *total* que es el doble de su energía cinética promedio. Esta es una propiedad común a todos los sistemas que tienen un solo grado de libertad y que llevan a cabo oscilaciones armónicas simples en el tiempo; casos conocidos son un péndulo o un resorte. Por lo tanto, de

acuerdo con la ley clásica de la equipartición, cada onda estacionaria en la cavidad tiene una energía total promedio

$$\bar{\mathscr{E}} = kT \tag{1-16}$$

El punto más importante que debe notarse, es que se predice la misma energía total promedio $\bar{\mathscr{E}}$, para todas las ondas estacionarias en la cavidad, independientemente de sus frecuencias.

La energía por unidad de volumen en el intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$ del espectro de cuerpo negro de una cavidad a temperatura T, es simplemente el producto de la energía promedio de cada onda estacionaria, por el número de ondas estacionarias en el intervalo de frecuencias dividido entre el volumen de la cavidad. Finalmente, de (1-15) y (1-16) se obtiene el resultado,

$$\rho_T(\nu)\, d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3}\, d\nu \tag{1-17}$$

Esta es la *fórmula de Rayleigh-Jeans, para la radiación de un cuerpo negro.*

En la figura 1-8 se comparan las predicciones de esta fórmula con los resultados experimentales. La discrepancia es evidente. En el límite de frecuencias bajas, el espectro clásico se aproxima a los resultados experimentales, pero, a medida que la frecuencia crece, la predicción teórica tiende a infinito. Los experimentos demuestran que la densidad de energía siempre permanece finita, como obviamente debe ser, y de hecho, la densidad de energía tiende a cero para frecuencias muy altas. Este comportamiento tan grotescamente irreal de la teoría clásica a altas frecuencias es conocido en física como la "catástrofe ultravioleta". Este término es sugestivo de la importancia de la falla de la teoría.

1.4 Teoría de Planck de la cavidad radiante

Tratando de resolver la discrepancia entre teoría y experimento, Planck llegó a considerar la posibilidad de que se violara la ley de equipartición de la energía en que se basaba la teoría. De la

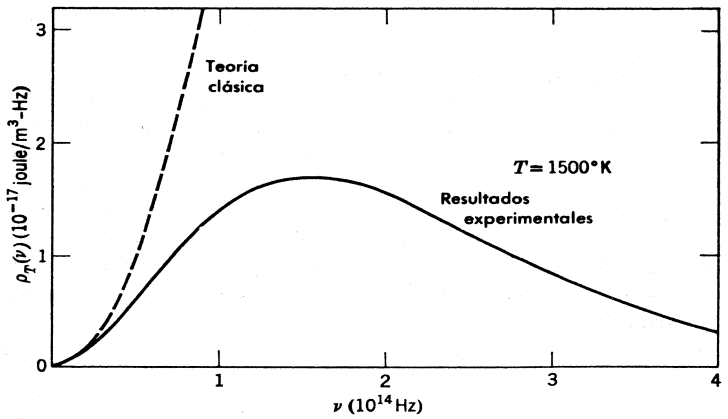


FIGURA 1-8

Predicción de Rayleigh-Jeans (línea punteada) comparada con los resultados experimentales (línea continua) para la densidad de energía en una cavidad-cuerpo negro que muestra la seria discrepancia llamada catástrofe ultravioleta.

figura 1-8 resulta evidente que la ley proporciona resultados satisfactorios a bajas frecuencias. Por lo tanto se puede suponer

$$\bar{\mathscr{E}} \xrightarrow[\nu \to 0]{} kT \tag{1-18}$$

Es decir, la energía total promedio tiende a T a medida que la frecuencia tiende a cero. La discrepancia a frecuencias altas se elimina si, por alguna razón, existe un corte, de modo que

$$\bar{\mathscr{E}} \xrightarrow[\nu \to \infty]{} 0 \tag{1-19}$$

es decir, si la energía total promedio tiende a cero cuando la frecuencia tiende a infinito. En otras palabras, Planck pensó que, dadas las circunstancias que prevalecen en el caso de la radiación del cuerpo negro, la energía promedio de una onda estacionaria es función de la frecuencia $\bar{\mathscr{E}}(\nu)$ con las propiedades indicadas por (1-18) y (1-19). Esto contrasta con la ley de equipartición de la energía que asigna a la energía promedio $\mathscr{E}$ un valor independiente de la frecuencia.

Veamos el origen de la ley de equipartición. Básicamente surge de un resultado mucho más completo de la teoría cinética clásica llamado distribución de Boltzmann. (En el apéndice C se dan los argumentos que conducen a la distribución de Boltzmann, para aquellos estudiantes que no estén familiarizados con ella.) Aquí se utilizará una forma especial de la distribución de Boltzmann

$$P(\mathscr{E}) = \frac{e^{-\mathscr{E}/kT}}{kT} \tag{1-20}$$

en la que $P(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}$ es la probabilidad de encontrar un ente dado de un sistema, con energía en el intervalo entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$, cuando el número de estados de energía para el ente en ese intervalo, es independiente de $\mathscr{E}$. Se supone que el sistema contiene un número grande de entes del mismo tipo, en equilibrio térmico a temperatura T, y k representa la constante de Boltzmann. La ecuación (1-20) gobierna las energías de los entes del sistema que se están considerando, a saber, un conjunto de ondas estacionarias que oscilan de modo armónico simple.

La función de distribución de Boltzmann está íntimamente relacionada con la función de distribución de Maxwell para la energía de una molécula en un sistema de moléculas en equilibrio térmico. De hecho, la exponencial en la función de distribución de Boltzmann es responsable por el factor exponencial en la distribución de Maxwell. Algunos estudiantes sabrán que existe un factor $\mathscr{E}^{1/2}$ presente en la distribución de Maxwell, que resulta por la circunstancia de que el número de estados de energía para una molécula en el intervalo entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ no es independiente de $\mathscr{E}$, sino que aumenta en proporción a $\mathscr{E}^{1/2}$.

La función de distribución de Boltzmann proporciona una información completa acerca de las energías de los entes del sistema, incluyendo desde luego, el valor promedio de las energías $\bar{\mathscr{E}}$. Esta última cantidad puede obtenerse usando (1-20) para $P(\mathscr{E})$ y evaluando las integrales en el cociente:

$$\bar{\mathscr{E}} = \frac{\displaystyle\int_0^\infty \mathscr{E} P(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}}{\displaystyle\int_0^\infty P(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}} \tag{1-21}$$

El integrando en el numerador es la energía $\mathscr{E}$, pesada por la probabilidad de que el ente se encontrará con esta energía. La energía promedio se obtiene integrando sobre todos los valores posibles de la energía. El denominador es la probabilidad de encontrar al ente con *cualquier* energía y por lo tanto deberá tener el valor uno; que lo tiene. La integral en el numerador puede evaluarse, y el resultado es justamente la ley de equipartición de la energía

$$\bar{\mathscr{E}} = kT \tag{1-22}$$

En lugar de llevar a cabo la evaluación, resultará más conveniente, por los argumentos siguientes, examinar la representación gráfica de $P(\mathscr{E})$ y $\bar{\mathscr{E}}$ que se muestran en la parte superior de la figura 1-9. Se grafica $P(\mathscr{E})$ como función de $\mathscr{E}$. Su valor máximo, $1/kT$, ocurre en $\mathscr{E} = 0$ y el valor de $P(\mathscr{E})$ decrece suavemente a medida que $\mathscr{E}$ aumenta y tiende a cero cuando $\mathscr{E} \to \infty$. Es decir, el valor que es más probable que se encontrará en una medida de $\mathscr{E}$, será cero. Pero el promedio $\bar{\mathscr{E}}$ de los resultados que se encontrarían en cierto número de medidas de $\mathscr{E}$ es mayor que cero. La evaluación de $\bar{\mathscr{E}}$ a partir de $P(\mathscr{E})$, se indica en la mitad inferior de la figura 1-9.

La gran contribución de Planck surgió cuando pudo darse cuenta que podía lograr el corte requerido, indicado en (1-19), si modificaba el cálculo que conduce a $\bar{\mathscr{E}}$ a partir de $P(\mathscr{E})$, tratando la energía $\mathscr{E}$ como si fuera una *variable discreta* en lugar de la *variable continua* que definitivamente es desde el punto de vista de la física clásica. Esto puede hacerse, cuantitativamente, si se vuelve a escribir (1-21) en términos de sumas en lugar de integrales. Pronto se verá

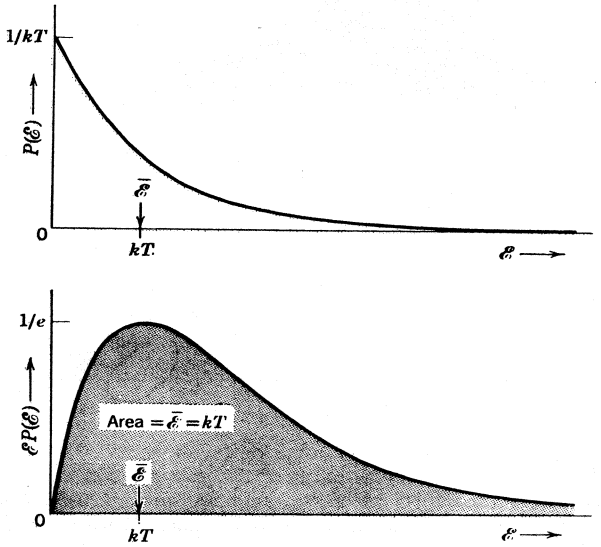


FIGURA 1-9

Arriba: Gráfica de la distribución de probabilidad de Boltzmann $P(\mathscr{E}) = e^{-\mathscr{E}/kT}/kT$. El valor promedio de la energía $\mathscr{E}$ para esta distribución es $\bar{\mathscr{E}} = kT$, que corresponde a la ley clásica de la equipartición de la energía. Para calcular este valor de $\bar{\mathscr{E}}$, se integra $\mathscr{E}P(\mathscr{E})$ de cero a infinito. Esto es justamente la cantidad que se está promediando, $\mathscr{E}$, multiplicada por la probabilidad relativa $P(\mathscr{E})$ de que el valor de $\mathscr{E}$ sea encontrado en una medida de la energía. *Abajo:* Gráfica de $\mathscr{E}P(\mathscr{E})$. El área bajo esta curva proporciona el valor de $\bar{\mathscr{E}}$.

que esto no es difícil de hacer, pero es más instructivo estudiar primero, la representación gráfica en la figura 1-10 .

Planck supuso que la energía $\mathscr{E}$ podía tomar sólo ciertos valores discretos, en lugar de cualquier valor, y que los valores discretos de la energía estaban uniformemente distribuidos; es decir, tomó

$$\mathscr{E} = 0, \Delta\mathscr{E}, 2\Delta\mathscr{E}, 3\Delta\mathscr{E}, 4\Delta\mathscr{E}, \ldots \tag{1-23}$$

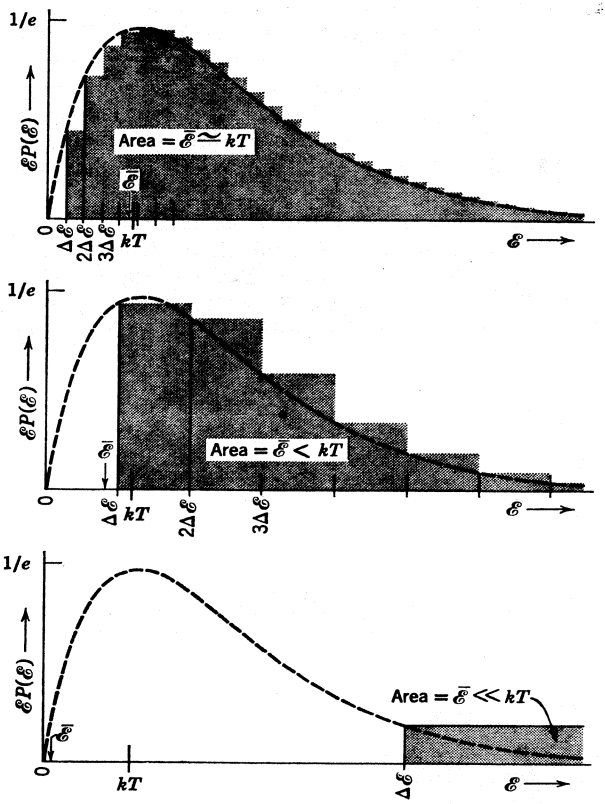


FIGURA 1-10

Arriba: Si la energía $\mathscr{E}$ no es una variable continua, sino que está restringida a valores $0, \Delta\mathscr{E}, 2\Delta\mathscr{E}, 3\Delta\mathscr{E}, \ldots,$ como se indica por las divisiones en el eje $\mathscr{E}$ de la figura, se debe cambiar la integral usada para calcular el valor promedio $\bar{\mathscr{E}}$ por una suma. El valor promedio es la suma de las áreas de los rectángulos, de amplitud $\Delta\mathscr{E}$, y con alturas dadas por los valores permitidos de $\mathscr{E}$ por $P(\mathscr{E})$al principiar cada intervalo. En la figura $\Delta\mathscr{E} \ll kT$, y por tanto, las energías permitidas están muy próximas entre sí y, consecuentemente, el área de los rectángulos difiere muy poco del área bajo la curva continua. Por lo tanto, el valor promedio $\bar{\mathscr{E}}$ es casi igual a kT, el valor encontrado en la figura 1-9. *Centro:* $\Delta\mathscr{E} \simeq kT$, y $\bar{\mathscr{E}}$ tiene un valor menor que el que tiene en el caso de arriba. *Abajo:* $\Delta\mathscr{E} \gg kT$,, y $\bar{\mathscr{E}}$ es aún menos. En las tres figuras, los rectángulos muestran la contribución de $\mathscr{E}P(\mathscr{E})$ al área total, para cada energía permitida. El rectángulo para $\mathscr{E} = 0$ es, desde luego, siempre de altura cero. Esto produce un gran efecto en el área total, si las amplitudes de los rectángulos son grandes.

como el conjunto de valores permitidos de la energía. El intervalo uniforme entre valores sucesivos de la energía, es en este caso $\Delta\mathscr{E}$. En la parte superior de la figura 1-10, se ilustra una evaluación de $\mathscr{E}$ a partir de $P(\mathscr{E})$, para un caso en el que $\Delta\mathscr{E} \ll kT$. En este caso el resultado que se obtiene es $\bar{\mathscr{E}} \simeq kT$. Es decir, el valor que aquí se obtiene es esencialmente el mismo que el resultado clásico, ya que, los valores discretos $\Delta\mathscr{E}$ son muy pequeños comparados con el intervalo de energías kT, en el cual $P(\mathscr{E})$ cambia significativamente; esencialmente, en este caso es indiferente si la energía $\mathscr{E}$ es discreta o continua. En la parte media de la figura 1-10, se ilustra el caso para $\Delta\mathscr{E} \simeq kT$. Aquí se encuentra que $\bar{\mathscr{E}} < kT$, ya que la mayoría de los entes tienen energía $\mathscr{E} = 0$, puesto que $P(\mathscr{E})$ tiene un valor pequeño para el primer valor permitido de $\Delta\mathscr{E}$ diferente de cero, de modo que el valor $\mathscr{E} = 0$ es dominante en el cálculo del valor promedio de $\mathscr{E}$ y el resultado que se obtiene es más pequeño. Sin embargo, en la parte inferior de la figura 1-10, donde se muestra el caso para $\Delta\mathscr{E} \gg kT$, se aprecia más claramente el efecto de tomar valores discretos. Para este caso, la probabilidad de encontrar un ente con una de las energías permitidas mayores que cero es despreciable, ya que, $P(\mathscr{E})$ es extremadamente pequeña para todos estos valores, y el resultado que se obtiene es $\bar{\mathscr{E}} \ll kT$.

Resumiendo, Planck descubrió que podía obtener $\bar{\mathscr{E}} \simeq kT$ cuando la diferencia entre energías adyacentes, $\Delta\mathscr{E}$, es pequeña y $\bar{\mathscr{E}} \simeq 0$, cuando $\Delta\mathscr{E}$ es grande. Como requería el primer resultado para valores pequeños de ν, y el segundo resultado para valores grandes de ν, obviamente era necesario que $\Delta\mathscr{E}$ fuese una función creciente de ν. Por trabajo numérico, encontró que podía tomar la relación más simple posible entre $\Delta\mathscr{E}$ y ν, que tuviera esta propiedad. Es decir, supuso que estas cantidades fueran proporcionales

$$\Delta\mathscr{E} \propto \nu \tag{1-24}$$

Escrita como una ecuación en lugar de una proporcionalidad, se tiene:

$$\Delta\mathscr{E} = h\nu \tag{1-25}$$

donde h es la constante de proporcionalidad.

Mediante trabajo numérico, Planck determinó el valor de esta constante, de modo que se obtuviera el mejor ajuste entre su teoría y los valores experimentales. El valor que obtuvo fue muy cercano al que es aceptado en la actualidad:

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}$$

Esta constante famosa, ahora se llama *constante de Planck*.

La fórmula que obtuvo Planck para $\bar{\mathscr{E}}$, evaluando la suma análoga a la integral en (1-21), y que se obtendrá en el ejemplo 1-4, es

$$\bar{\mathscr{E}}(\nu) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{1-26}$$

Ya que $e^{h\nu/kT} \to 1 + h\nu/kT$ para $h\nu/kT \to 0$, se tiene que $\bar{\mathscr{E}}(\nu) \to kT$ en este límite, como se predice en (1-18). En el límite $h\nu/kT \to \infty$, $e^{h\nu/kT} \to \infty$, y $\bar{\mathscr{E}}(\nu) \to 0$, en concordancia con la predicción de (1-19).

La fórmula que se obtiene inmediatamente para la densidad de energía en el espectro del cuerpo negro, utilizando el resultado para $\bar{\mathscr{E}}(\nu)$ en lugar del valor clásico $\mathscr{E} = kT$, es:

$$\rho_T(\nu)\, d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}\, d\nu \tag{1-27}$$

Esto es, el *espectro del cuerpo negro de Planck*. En la figura 1-11, se comparan los resultados de la teoría de Planck (expresados en términos de longitudes de onda) con resultados experimentales

para una temperatura $T = 1595^{\circ}$K. Los resultados experimentales concuerdan con la fórmula de Planck, para toda temperatura.

Debe recordarse que Planck no alteró la distribución de Boltzmann, "todo" lo que hizo fue considerar la energía de las ondas electromagnéticas estacionarias, oscilando senoidalmente en el tiempo, como una cantidad discreta en lugar de una cantidad continua.

Ejemplo 1-4. Derivar la expresión de Planck para la energía promedio $\bar{\mathscr{E}}$ y su espectro del cuerpo negro.

La cantidad $\bar{\mathscr{E}}$ se calcula de la razón de las sumas

$$\bar{\mathscr{E}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \mathscr{E} P(\mathscr{E})}{\sum_{n=0}^{\infty} P(\mathscr{E})}$$

análogas a la razón de integrales en (1-21). Debido al postulado de Planck, la energía $\mathscr{E}$ se convierte en una variable discreta que toma sólo los valores $\mathscr{E} = 0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \ldots$ y por lo tanto, se deben utilizar sumas. Es decir, $\mathscr{E} = nh\nu$, donde $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Evaluando la distribución de Boltzmann $P(\mathscr{E}) = e^{-\mathscr{E}/kT}/kT$, se tiene

$$\bar{\mathscr{E}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{nh\nu}{kT} e^{-nh\nu/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{kT} e^{-nh\nu/kT}} = kT \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\alpha e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}} \qquad \text{donde } \alpha = \frac{h\nu}{kT}$$

Lo anterior, a su vez, puede evaluarse más fácilmente si se observa que;

$$-\alpha \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = \frac{-\alpha \frac{d}{d\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}} = \frac{-\sum_{n=0}^{\infty} \alpha \frac{d}{d\alpha} e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\alpha e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}}$$

de manera que,

$$\bar{\mathscr{E}} = kT\left(-\alpha \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}\right) = -h\nu \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}$$

Ahora bien.

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = 1 + e^{-\alpha} + e^{-2\alpha} + e^{-3\alpha} + \cdots$$

$$= 1 + X + X^2 + X^3 + \cdots \qquad \text{donde } X = e^{-\alpha}$$

pero

$$(1 - X)^{-1} = 1 + X + X^2 + X^3 + \cdots$$

de modo que;

$$\bar{\mathscr{E}} = -h\nu \frac{d}{d\alpha} \ln (1 - e^{-\alpha})^{-1}$$

$$= \frac{-h\nu}{(1 - e^{-\alpha})^{-1}} (-1)(1 - e^{-\alpha})^{-2} e^{-\alpha}$$

$$= \frac{h\nu e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} = \frac{h\nu}{e^{\alpha} - 1} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Se ha derivado (1-26) para la energía promedio de una onda electromagnética estacionaria de frecuencia ν. Multiplicando lo anterior por (1-12), a saber, el número $N(\nu)\,d\nu$ de ondas que tienen frecuencia ν, que se derivó en el ejemplo 1-3, inmediatamente se obtiene el espectro de Planck del cuerpo negro, (1-27). ◀

Ejemplo 1-5. Al analizar resultados experimentales, como en la figura 1-11, resulta conveniente expresar el espectro de Planck del cuerpo negro, en función de la longitud de onda λ , en lugar de la

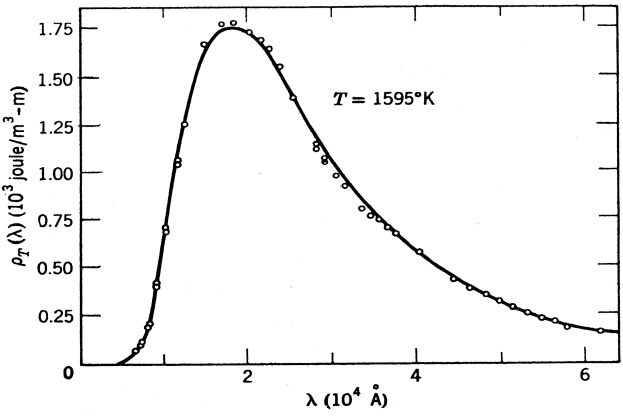


FIGURA 1-11

Predicción de Planck de la densidad de energía (línea continua) comparada con los resultados experimentales (círculos) para la densidad de energía de un cuerpo negro. Los datos fueron reportados por Coblentz en 1916, correspondientes a una temperatura de 1595°K. El autor señala en su artículo que después de dibujar las curvas de los espectros de energía que resultaron de sus experimentos, "debido a fatiga de los ojos, fue imposible durante los meses subsiguientes, dedicar atención a la reducción de los datos". Una vez que los datos fueron reducidos, se obtuvo un valor de la constante de Planck de 6.57×10^{-34} joule-seg.

frecuencia ν. Obtener $\rho_T(\lambda)$, el espectro de Planck en términos de la longitud de onda, a partir de $\rho_T(\nu)$, la forma del espectro en términos de ν. La cantidad $\rho_T(\lambda)$ se define por la igualdad $\rho_T(\lambda)\, d\lambda = -\rho_T(\nu)\, d\nu$. El signo menos indica que aunque $\rho_T(\lambda)$ y $\rho_T(\nu)$ son positivas ambas $d\lambda$ y $d\nu$ tienen signos opuestos. (Un aumento en la frecuencia corresponde a una disminución en la longitud de onda).

De la relación $\nu = c/\lambda$ se tiene que $d\nu = -(c/\lambda^2)\, d\lambda$, o bien, $d\nu/d\lambda = -(c/\lambda^2)$, de manera que

$$\rho_T(\lambda) = -\rho_T(\nu)\frac{d\nu}{d\lambda} = \rho_T(\nu)\frac{c}{\lambda^2}$$

Si ahora se sustituye $\nu = c/\lambda$ en la expresión para $\rho_T(\nu)$ (1-27), se obtiene

$$\rho_T(\lambda)\, d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{d\lambda}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \tag{1-28}$$

En la figura 1-12 se muestra $\rho_T(\lambda)$ contra λ para diferentes temperatuas. Al estudiar la distribución de energía radiante como función de la longitud de onda, a medida que aumenta la temperatura, se puede observar, claramente, una tendencia en la radiación del rojo al blanco y al azul. ◀

A partir de la fórmula de Planck, se pueden derivar la ley de Stefan y la ley del desplazamiento de Wien; si se las ajusta a los resultados experimentales, se pueden determinar valores para las constantes h y k. La ley de Stefan se obtiene integrando la ley de Planck en todo el espectro de longitudes de onda. Se encuentra que la radiancia es proporcional a la cuarta potencia de la temperatura, identificando la constante de proporcionalidad $2\pi^5 k^4/15c^2h^3$ con la constante de Stefan, σ, cuyo valor, determinado experimentalmente, es 5.67×10^{-8} W/m^2-°K^4. La ley del desplazamiento de Wien, se obtiene haciendo $d\rho(\lambda)/d\lambda = 0$. y se encuentra que $\lambda_{\text{máx}} T =$

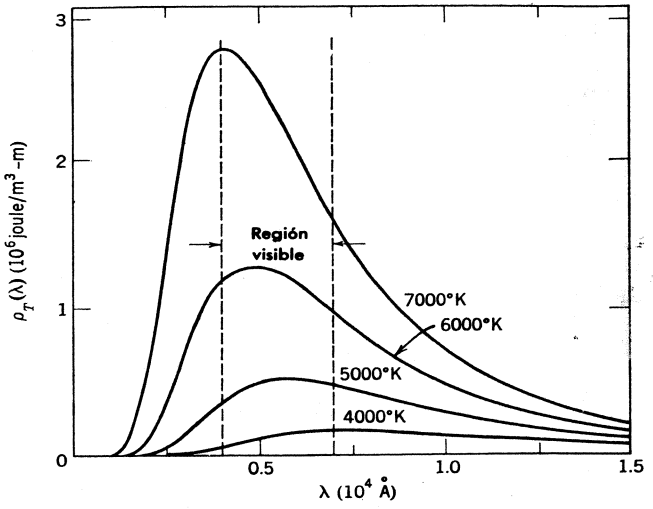


FIGURA 1-12

Densidad de energía de Planck de la radiación de un cuerpo negro, a varias temperaturas, como función de la longitud de onda. Obsérvese que la longitud de onda para la cual la curva tiene un máximo, decrese a medida que la temperatura aumenta.

$0.2014hc/k$; identificándose al miembro a la derecha de la ecuación con la constante, 2.898×10^{-13} m-°K, determinada experimentalmente por Wien. Utilizando estos valores medidos y suponiendo un valor para la velocidad de la luz c, se pueden calcular los valores de h y k. De hecho, ésto lo realizó Planck y sus valores concuerdan muy bien con los obtenidos posteriormente por otros métodos.

1.5 Aplicación de la ley de radiación de Planck en termometría

La radiación emitida por un cuerpo caliente puede utilizarse para medir su temperatura. Si lo que se utiliza es la radiación total, entonces, de la ley de Stefan-Boltzmann, se sabe que las energías emitidas por dos fuentes están en razón de la cuarta potencia de la temperatura. Sin embargo, es difícil medir la radiación total de la mayoría de las fuentes y realmente, lo que se mide es la radiancia en una banda finita de longitudes de onda. En este caso se utiliza la ley de radiación de Planck que proporciona la radiancia como función de la temperatura y longitud de onda. Para radiación monocromática de longitud de onda λ la razón de intensidades espectrales emitidas por fuentes a T_2°K y T_1°K, está dada por la ley de Planck como:

$$\frac{e^{hc/\lambda kT_1} - 1}{e^{hc/\lambda kT_2} - 1}$$

En esta expresión, si se toma T_1, como temperatura de referencia estándar, se puede determinar T_2 relativa a la estándar, midiendo esa razón en forma experimental. Este es el procedimiento empleado en la Escala Internacional de Temperaturas Prácticas, donde se utiliza el punto de fusión del oro, 1068°C, como punto fijo de referencia. Es decir, el *pirómetro óptico* estándar primario, está diseñado de modo tal, que compara la radiación de un cuerpo negro, a

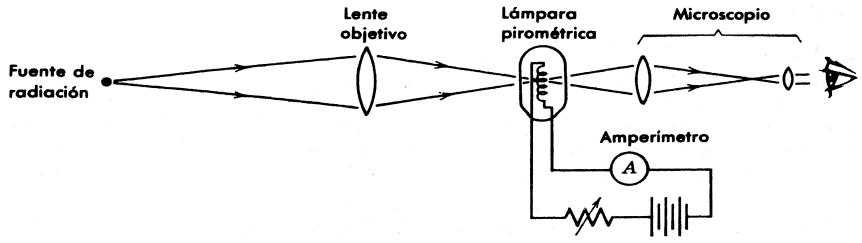


FIGURA 1-13

Diagrama esquemático de un pirómetro óptico.

temperatura desconocida $T > 1068^{\circ}C$ con un cuerpo negro a la temperatura de fusión del oro. Dadas las circunstancias prácticas, la mayoría de las fuentes no son cuerpos negros y en lugar de la radiación monocromática se utiliza una banda finita de longitudes de onda, de modo que los procedimientos de medida deben ser adecuados y la teoría desarrollada, para tomar en consideración las circunstancias anteriores.

La mayoría de los pirómetros ópticos, utilizan el ojo humano como detector y requieren de un ancho de banda espectral suficientemente amplio, de modo que se tenga la energía que el ojo puede ver. El tipo de instrumento más simple y más preciso utilizado por encima del punto de fusión del oro, es el pirómetro óptico con filamento desvanescente, (ver figura 1-13). La fuente a medirse se enfoca en el filamento de la lámpara del pirómetro, ajustándose la corriente de la lámpara hasta que el filamento tienda a desaparecer en el fondo de la imagen de la fuente. Calibrando cuidadosamente mediante potenciómetros de precisión, se garantizan medidas precisas de la temperatura.

En la década 1950, Dicke, Penzias y Wilson descubrieron un interesante caso particular del campo general de la termometría por medio de radiación de cuerpo negro. Utilizando un radio telescopio que operaba en el intervalo de longitudes de onda entre varios milímetros y varios centímetros, encontraron que un espectro de cuerpo negro, con temperatura característica de $3^{\circ}K$, incide sobre la tierra en todas direcciones con igual intensidad. La uniformidad en dirección indica que la radiación llena uniformemente el universo. Los astrofísicos consideraron estas medidas como evidencia fuerte en favor de la llamada *teoría de la gran explosión*, en la cual, el universo consistía de una bola de fuego muy densa y muy caliente de radiación y partículas, aproximadamente hace 10^{10} años. Debido a una expansión posterior y el consecuente corrimiento Doppler, es de esperarse que la temperatura de la radiación disminuyera a un valor muy cercano del observado de $3^{\circ}K$.

1.6 El postulado de Planck y sus implicaciones

La contribución de Planck se puede enunciar en forma de postulado, como sigue:

Cualquier ente físico con un grado de libertad, cuya "coordenada" es una función senoidal del tiempo (es decir realiza oscilaciones armónico-simples) sólo puede poseer energías totales $\mathscr{E}$, que satisfacen la relación

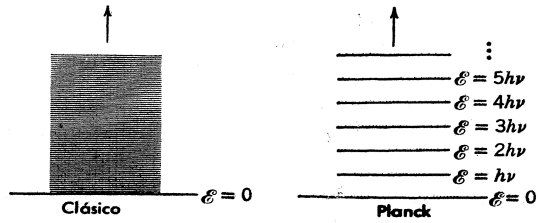
$$\mathscr{E} = nh\nu \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

donde ν es la frecuencia de la oscilación y h es una constante universal

La palabra coordenada se utiliza en su sentido más general, para denotar cualquier cantidad que describa la condición instantánea del ente, por ejemplo, la longitud de un resorte, la

FIGURA 1-14

Izquierda: Energías permitidas en un sistema clásico, oscilando senoidalmente con frecuencia ν, distribuidas en forma continua. *Derecha:* Energías permitidas distribuidas en forma discreta de acuerdo con el postulado de Planck, ya que sólo pueden tener los valores $nh\nu$. Se dice que la energía está cuantizada, siendo n el número cuántico del estado de energía permitido.



posición angular de la masa de un péndulo y la amplitud de una onda. Todos estos ejemplos también son funciones senoidales del tiempo.

Un modo conveniente de ilustrar el comportamiento de un ente gobernado por este postulado, es mediante un diagrama de niveles de energía, como se muestra en la figura 1-14, que también puede utilizarse para contrastar este comportamiento con el que se esperaría en base a la física clásica. En ese diagrama se indican cada uno de los estados de energía posibles del ente, por una línea horizontal. La distancia de una línea determinada, a la línea de energía cero, es proporcional a la energía total que le corresponde. Como de acuerdo con la física clásica, el ente puede tener cualquier energía entre cero e infinito, el diagrama clásico de niveles de energías consiste de un continuo de líneas que empiezan en cero y se extiende a valores mayores. Sin embargo, el ente que realiza oscilaciones del tipo oscilador armónico simple, sólo puede tener energías totales discretas, $\mathscr{E} = 0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu \ldots$, si obedece el postulado de Planck. En su diagrama de niveles de energía, esto se indica con un conjunto discreto de líneas. Si la energía del ente obedece el postulado de Planck, se dice que está *cuantizada,* los niveles de energía permitidos se llaman *estados cuánticos* y el número entero n se llama el *número cuántico.*

El estudiante podría pensar que existen sistemas físicos cuyo comportamiento esté en obvio desacuerdo con el postulado de Planck. Por ejemplo, un péndulo ordinario realiza oscilaciones de tipo oscilador armónico simple y sin embargo, aparentemente es capaz de poseer valores continuos de la energía. Pero antes de aceptar este argumento, se harán algunos cálculos numéricos en relación con dicho sistema.

Ejemplo 1-6. Un péndulo que consiste de una masa de 0.01 Kg. suspendida de una cuerda de 0.1 m. de longitud. Sea la amplitud de su oscilación tal, que la cuerda en sus posiciones extremas forma un ángulo de 0.1 rad. con la vertical. La energía del péndulo decrece, por ejemplo, por efectos de fricción. ¿Se observará que este decremento de la energía es continuo o discontinuo?

La frecuencia de oscilación del péndulo es:

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{g}{l}} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{9.8 \text{ m/seg}^2}{0.1 \text{ m}}} = 1.6/\text{seg}$$

La energía del péndulo es su energía potencial máxima

$$mgh = mgl(1 - \cos\theta) = 0.01 \text{ kg} \times 9.8 \text{ m/seg}^2 \times 0.1 \text{ m} \times (1 - \cos 0.1)$$
$$= 5 \times 10^{-5} \text{ joule}$$

La energía del péndulo está cuantizada, de modo que los cambios en energía ocurren en pasos de magnitud discontinuos $\Delta E = h\nu$, pero

$$\Delta E = h\nu = 6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 1.6/\text{seg} = 10^{-33} \text{ joule}$$

mientras que $E = 5 \times 10^{-5}$ joule. Por lo tanto, $\Delta E/E = 2 \times 10^{-29}$. Así pues, para poder medir que el decremento de la energía es discreto, se necesita poder medir la energía con una precisión de 2 en 10^{29}.

Evidentemente aún el equipo experimental más sensible, resulta totalmente incapaz para obtener dicha resolución en la energía. ◀

En conclusión, aquellos experimentos que involucren péndulos ordinarios, no podrán determinar si el postulado de Planck es válido o no. La pequeñez de h, hace que la granularidad de la energía sea tan fina que no pueda distinguirse de un continuo de energías. Más aún, para sistemas clásicos, la h podría considerarse igual a cero y, de hecho, un modo de reducir las fórmulas cuánticas a sus límites clásicos, es dejando $h \to 0$ en estas fórmulas. Solamente cuando se consideren sistemas en los cuales ν sea tan grande y/o $\mathscr{E}$ tan pequeña que $\Delta\mathscr{E} = h\nu$ sea del orden de $\mathscr{E}$, se estará en condiciones de probar el postulado de Planck. Un ejemplo es, desde luego, la radiación de ondas estacionarias de alta frecuencia del cuerpo negro. En los siguientes capítulos se considerarán muchos otros ejemplos.

1.7 Un poco de la historia del quantum

El postulado de Planck, en su forma original, no tenía el alcance que tiene en la forma como aquí se ha presentado. En su trabajo original, Planck trató en detalle, el comportamiento de los electrones en las paredes de un cuerpo negro y su acoplamiento a la radiación electromagnética dentro de la cavidad. Este acoplamiento conduce al mismo factor ν^2 que se obtuvo en (1-12) de argumentos más generales debidos a Rayleigh y Jeans. A través de este acoplamiento, Planck relacionaba la energía en una componente particular de las frecuencias de radiación del cuerpo negro, con la energía de un electrón en la pared, oscilando senoidalmente a la misma frecuencia y postuló que únicamente la energía de la partícula oscilante está cuantizada. No fue sino hasta un tiempo después, que, Planck aceptó la idea de que las ondas electromagnéticas oscilantes estuvieran así mismo cuantizadas y el postulado se amplió para incluir cualquier ente cuya única coordenada oscile senoidalmente.

En un principio, Planck no estaba seguro si su introducción de la constante h no era más que un recurso matemático o un asunto con significado físico muy profundo. En una carta dirigida a R.W. Wood, Planck llamó a su postulado limitado, "un acto de desesperación". "Sabía", escribió, "que el problema (del equilibrio de la materia con la radiación) tiene una importancia fundamental para la física; conocía la fórmula que reproduce la distribución de energías en el espectro normal; una interpretación teórica tenía que encontrarse a cualquier precio, sin importar qué tan alto". Por más de una década, Planck trató de ajustar las ideas cuánticas a la teoría clásica. Con cada intento aparentaba retroceder de su osadía original, pero siempre generaba nuevas ideas y técnicas que posteriormente adoptó la teoría cuántica. Lo que parece ser que finalmente lo convenció de que su hipótesis cuántica era correcta y de significado profundo, fue su apoyo a la definitividad del concepto estadístico de la entropía y a la tercera ley de la termodinámica.

Fue durante este período de dudas, que Planck era editor de la revista de investigación alemana *Annalen der Physik*. En 1905 recibió el primer artículo de Einstein sobre relatividad, y valientemente defendió el trabajo de Einstein. A partir de entonces se convirtió en uno de los defensores del joven Einstein en los círculos científicos, pero resistió durante algún tiempo, precisamente aquellas ideas de Einstein, sobre la teoría cuántica de la radiación, que contribuyeron a confirmar y extender el propio trabajo de Planck. La profunda visión que Einstein tenía del electromagnetismo y la mecánica estadística, que posiblemente no fue igualada por sus contemporáneos, le permitió predecir, como resultado del trabajo de Planck, la necesidad de un cambio general en la mecánica estadística y el electromagnetismo. Muchos fenómenos físicos fueron predichos e interpretados anticipadamente los cuales posteriormente fueron dramáticamente confirmados experimentalmente. En el siguiente capítulo se tratará uno de estos fenómenos y se seguirá otro camino rumbo a la mecánica cuántica.

PREGUNTAS

1. ¿Un cuerpo negro siempre se ve negro? Explique el término cuerpo negro.

2. En un fuego hecho con carbón, los huecos que quedan entre carbones se ven más brillantes que los

carbones mismos. ¿Será la temperatura de dichos huecos, apreciablemente mayor que la correspondiente a la superficie exterior de un carbón incandescente?

3. Si se observa dentro de una cavidad cuyas paredes se mantienen a una temperatura constante, ¿es visible algún detalle del interior? Explíquese.

4. La relación $R_T = \sigma T^4$ es exacta para cuerpos negros y se mantiene a toda temperatura. ¿Por qué no se utiliza esta relación como base para una definición de temperatura, por ejemplo, 100°C?

5. Un pedazo de metal se pone incandescente con un color rojo brillante a 1100°K. Sin embargo, a esta misma temperatura, un pedazo de cuarzo simplemente no brilla. Explique. (Sugerencia: el cuarzo es transparente a la luz visible).

6. Haga una lista de las funciones de distribución que más comúnmente se usan en las ciencias sociales (es decir, distribución de familias respecto de sus ingresos). En cada caso, especifique si la variable de la distribución descrita es discreta o continua.

7. En (1-4) se relacionan radiancia espectral y densidad de energía, ¿qué unidades deberá tener la constante de proporcionalidad?

8. ¿Cuál es el origen de la catástrofe ultravioleta?

9. La ley de equipartición de la energía requiere que el calor específico de los gases sea independiente de la temperatura, en desacuerdo con la experimentación. Aquí se ha visto que conduce a la ley de radiación de Rayleigh-Jeans, que también está en desacuerdo con la experimentación, ¿se pueden relacionar estas dos fallas de la ley de equipartición?

10. Comparar las definiciones y dimensiones de radiancia espectral, $R_T(\nu)$, radiancia, R_T, y densidad de energía $\rho_T(\nu)$.

11. ¿Por qué se utiliza la pirometría óptica por arriba del punto de fusión del oro y no por abajo de él? ¿En qué objetos se mide típicamente la temperatura de este modo?

12. ¿Existen cantidades cuantizadas en física clásica? ¿Está cuantizada la energía en física clásica?

13. ¿Tiene sentido hablar en física de cuantización de carga? ¿En qué sentido difiere de la cuantización de la energía?

14. Las partículas elementales parecen tener un conjunto discreto de masas en reposo. ¿Se puede ésto considerar como cuantización de masa?

15. En muchos sistemas clásicos las frecuencias permitidas están cuantizadas. Mencione algunos de dichos sistemas. ¿También se cuantiza la energía?

16. Demuestre que la constante de Planck tiene dimensiones de impulso angular. ¿Sugiere ésto, necesariamente, que el impulso angular es una cantidad cuantizada?

17. ¿Cuál deberá ser el orden de magnitud mínimo de h, para que los efectos cuánticos sean efectos cotidianos?

18. La radiación universal de cuerpo negro a 3°K, ¿qué puede decir, si acaso, de la temperatura del espacio exterior?

19. La teoría de Planck ¿sugiere estados de energía atómicos cuantizados?

20. Discutir el hecho sorprendente de que la discresión de la energía se descubrió, por primera vez, al analizar el espectro continuo emitido por átomos interactuantes en un sólido, en lugar de encontrarlo en el análisis de un espectro discreto tal como el emitido por un átomo aislado en un gas.

PROBLEMAS

1. ¿A qué longitud de onda, una cavidad a 6000°K radiará más por unidad de longitud de onda?

2. Demuestre que la constante de proporcionalidad en (1-4) es $4/C$. Es decir, demuestre que la relación entre la radiancia espectral $R_T(\nu)$ y la densidad de energía $\rho_T(\nu)$ es $R_T(\nu)\,d\nu = (c/4)\rho_T(\nu)\,d\nu$.

3. Considere dos cavidades de forma y material arbitrarios, cada una a la misma temperatura T, conectadas por un tubo angosto en el que se pueden colocar filtros de colores (supuestamente ideales) que permitirán el paso de radiación de una sola frecuencia ν. (a) Suponga que para cierta frecuencia ν', $\rho_T\ (\nu')$ para la cavidad 1, resulta mayor que $\rho_T(\nu')\,d\nu$ para la cavidad 2. Se coloca un filtro en el tubo interconector, que sólo deja pasar la frecuencia ν. Analice qué sucederá en términos de flujo de energía. (b) Qué pasará con sus temperaturas respectivas. (c) Demuestre que esto violaría la segunda ley de la termodinámica; por lo tanto, pruebe que todos los cuerpos negros a la misma temperatura emitirán radiación térmica con el mismo espectro, independientemente de su composición.

4. Un radiador de cavidad, tiene un agujero de 10.0 mm. de diámetro que se perforó en una pared. Encuentre la potencia radiada a través del agujero, en el intervalo entre 5500 - 5510 Å. (Sugerencia: ver el problema 2).

5. (a) Suponiendo que la temperatura en la superficie del sol es 5700°K, utilice la ley de Stefan, (1-2), para determinar la masa en reposo que se pierde por segundo en la radiación del sol. Tome el diámetro del sol como 1.4×10^9 m. (b) ¿Qué fracción de la masa en reposo del sol, se pierde cada año en radiación electromagnética? Suponga que la masa en reposo del sol es 2.0×10^{30}kg.

6. En una explosión termonuclear, la temperatura en la bola de fuego es, momentáneamente, 10^7 °K. Encuentre la longitud de onda para la cual la radiación emitida es máxima.

7. A una temperatura dada . $\lambda_{máx} = 6500$ Å para una cavidad de cuerpo negro. ¿Cuál será $\lambda_{máx}$ si la temperatura de las paredes de la cavidad aumenta de modo que la razón de emisión de radiación espectral se duplica?

8. ¿A qué longitud de onda emite el cuerpo humano su radiación térmica máxima? Haga una lista de las hipótesis que se hagan para llegar a una respuesta.

9. Suponiendo que $\lambda_{máx}$ está en el infrarrojo carcano para calor rojo, y en el ultravioleta cercano para calor azul. En la ley del desplazamiento de Wien aproximadamente, ¿qué temperatura corresponderá al calor rojo? ¿Al calor azul?

10. La razón *promedio* de radiación solar que incide sobre la tierra, por unidad de área es 0.485 cal/cm²-min (o 355 W/m²). (a) Explique la consistencia de este número con la constante solar (energía solar que llega a la tierra por unidad de tiempo incidiendo normal a una unidad de área de la superficie terrestre) cuyo valor es 1.94 cal/cm²-min (o 1340 W/m²). (b) Considere la tierra como un cuerpo negro que radía energía al espacio en esta misma razón. ¿Cuál sería la temperatura de la superficie de la tierra bajo estas circunstancias?

11. Demuestre que la ley de radiación de Rayleigh-Jeans, (1-17), no es consistente con la ley del desplazamiento de Wien $\nu_{max} \propto T$, (1-3a), o $\lambda_{max}\,T =$ const, (1-3b).

12. A partir del espectro del cuerpo negro, ν_{max} se puede obtener de $d\rho_T(\nu)/d\nu = 0$ y λ_{max} de $d\rho_T(\lambda)/d\lambda = 0$. ¿Por qué a partir de $\lambda_{máx}\,T =$ const o $\nu_{max} =$ const $\times\ T$ no es posible obtenerlas si se utiliza simplemente $\lambda_{max} = c/\nu_{max}$? Es decir, ¿por qué es erróneo suponer que $\nu_{max}\lambda_{max} = c$, *donde* c es la velocidad de la luz?

13. Considere los números siguientes: 2, 3, 3, 4, 1, 2, 2, 1, 0, como representando el número de cuadrangulares, logrado por cada miembro de los Orioles de Baltimore en un juego reciente. (a) Calcular directamente el número promedio de cuadrangulares por hombre. (b) Sea x una variable que

especifica el número de cuadrangulares obtenidos por un hombre, y sea $f(x)$ el número de veces que el número x aparece. Demuestre que el número promedio de cuadrangulares por hombre se puede escribir como

$$\bar{x} = \frac{\sum_0^4 xf(x)}{\sum_0^4 f(x)}$$

(c) Sea $p(x)$ la probabilidad de obtener el número x. Demuestre que x está dado por

$$(x)dx \sum_{\blacktriangledown}^{0} = \underline{x}$$

14. Considere la función

$$f(x) = \frac{1}{10}(10 - x)^2 \qquad 0 \leq x \leq 10$$

$$f(x) = 0 \qquad \text{para cualquier otra } x$$

(a) A partir de

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xf(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx}$$

encuentre el valor promedio de x. (b) Suponga que la variable x es discreta en lugar de continua. Además, $\Delta x = 1$, de modo que x sólo toma valores enteros 0, 1, 2,..., 10. Calcule $\bar{x}$ y compárelo con el resultado de la parte (a). (Sugerencia: puede ser más fácil calcular la suma apropiada directamente, en lugar de trabajar con fórmulas generales de sumas). (c) Calcule $\bar{x}$ para $\Delta x = 5$, es decir $x = 0{,}5$, 10. Compárelo con el resultado de la parte (a). (b) Obtenga analogías entre los resultados obtenidos en este problema y el análisis de la sección 1-4. Asegúrese de entender los papeles que juegan $\bar{\mathscr{E}}$, $\Delta\mathscr{E}$, y $P(\mathscr{E})$.

15. Usando la relación $P(\mathscr{E}) = e^{-\mathscr{E}/kT}/kT$ y $\int_0^\infty P(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = 1$, evaluar la integral de (1-21), para deducir (1-22), $\bar{\mathscr{E}} = kT$.

16. Utilizando la relación $R_T(\nu)\,d\nu = (c/4)\rho_T(\nu)\,d\nu$ entre la radiancia espectral y la densidad de energía junto con la ley de radiación de Planck, derivar la ley de Stefan. Es decir, demuestre que:

$$R_T = \int_0^\infty \frac{2\pi h}{c^2} \frac{\nu^3\,d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \sigma T^4$$

donde $\sigma = 2\pi^5 k^4/15c^2h^3$

$$\left(\text{Sugerencia: } \int_0^\infty \frac{q^3\,dq}{e^q - 1} = \frac{\pi^4}{15}. \right)$$

17. Derive la ley del desplazamiento de Wien, $\lambda_{\text{máx}}\,T = 0.2014\,hc/k$,, resolviendo la ecuación $d\rho(\lambda)/d\lambda = 0$. (Sugerencia: haga $hc/\lambda kT = x$ y demuestre que la ecuación citada conduce a $e^{-x} + x/5 = 1$. Después, demuestre que $x = 4.965$ es la solución).

18. Para verificar exprese mentalmente que la recientemente descubierta radiación universal de 3°K, se ajusta precisamente a un espectro de cuerpo negro, se decide medir $R_T(\lambda)$ desde una λ debajo de $\lambda_{\max}$, donde su valor es $0.2R_T(\lambda_{\max})$hasta una λ por encima de $\lambda_{\max}$ donde su valor es otra vez $0.2R_T(\lambda_{\max})$. ¿En qué intervalo de λ deberán hacerse las medidas?

2

Fotones-Propiedades corpusculares de la radiación

2.1 Introducción 47

Interacción de radiación con materia.

2.2 El efecto fotoeléctrico 47

Potencial de frenamiento; frecuencia de corte; ausencia de tiempo de retraso.

2.3 Teoría cuántica de Einstein del efecto fotoeléctrico 50

Fotones; cuantización de la energía del fotón, función de trabajo; reevaluación de la constante de Planck; espectro electromagnético; conservación del impulso.

2.4 El efecto Compton 55

Corrimiento Compton; derivación de las ecuaciones de Compton; longitud de onda de Compton; dispersión de Thomson; competencia entre las dispersiones Thomson y Compton.

2.5 Naturaleza dual de la radiación electromagnética 61

Difracción; desdoblamiento de personalidad de la radiación electromagnética; actitud contemporánea de los Físicos.

2.6 Fotones y emisión de rayos X 62

Emisión de rayos X; bremsstrahlung; relación de bremsstrahlung a efecto foto-eléctrico.

2.7 Producción y aniquilación de pares 65

Positrones; producción de pares electrón-positrón; aniquilación de pares; positronio; teoría de Dirac de los positrones.

2.8 Secciones transversales para absorción y dispersión de fotones 70

Definición de sección transversal; dependencia con la energía de las secciones transversales de la dispersión, fotoeléctrica, de producción de pares y total; atenuación exponencial; coeficientes y longitudes de atenuación.

Preguntas 74

Problemas 75

2

Fotones-Propiedades corpusculares de la radiación

2.1 Introducción

En este capítulo se examinarán los procesos en los cuales la radiación interacciona con la materia. Los procesos que implican la dispersión o absorción de radiación por materia son tres, a saber: el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y la producción de pares. Mientras que la producción de radiación se debe al bremsstrahlung o a la aniquilación de pares. En cada caso se obtendrá evidencia experimental de que la radiación es de carácter corpuscular en su interacción con la materia a diferencia de su naturaleza ondulatoria cuando se propaga. En el capítulo siguiente se estudiará una generalización de este resultado debida a de Broglie, y que conduce directamente a la mecánica cuántica. Parte del material de estos dos capítulos será una revisión de tópicos que el estudiante conoce de sus cursos de física elemental.

2.2 El efecto fotoeléctrico

Los experimentos que confirmaron por vez primera la existencia de las ondas electromagnéticas y la teoría electromagnética de Maxwell acerca de la propagación de la luz fueron realizados por Heinrich Hertz en 1886 y 1887. Es uno de aquellos hechos fascinantes y paradójicos en la historia de la ciencia es el que Hertz observó en el curso de sus experimentos, este efecto lo usaría Einstein después para contradecir otros aspectos de la teoría electromagnética clásica. Hertz descubrió que una descarga eléctrica entre dos electrodos ocurre más fácilmente cuando sobre uno de ellos incide luz ultravioleta. Lenard, continuando algunos experimentos de Hallwachs demostró en seguida que la luz ultravioleta facilita la descarga debido a que ocasiona la emisión de electrones desde la superficie del cátodo, a esta emisión de electrones desde una superficie por la acción de la luz se le denomina *efecto fotoeléctrico.*

En la figura 2-1 se muestra un aparato utilizado para estudiar el efecto fotoeléctrico. Una envoltura de vidrio encierra al aparato en un espacio al vacío, la luz incidente que es monocromática penetra a través de una ventana de cuarzo, incide sobre la placa de metal A y libera electrones, (llamados *fotoelectrones*). Los cuales si es que son atraídos a la copa de metal B mediante una diferencia de potencial V aplicada entre A y B se podrán detectar como una corriente. El amperímetro G sirve para medir esta corriente fotoeléctrica.

La curva a de la figura 2-2 es una gráfica de la corriente fotoeléctrica como función de la diferencia de potencial V para un aparato como el de la figura 2-1. Si V se hace lo suficientemente grande, la corriente fotoeléctrica alcanza cierto valor límite (valor de saturación), para el cual todos los fotoelectrones emitidos desde A son colectados por la copa B.

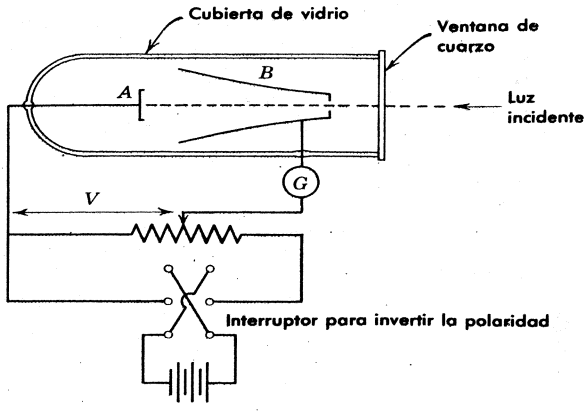


FIGURA 2-1

Aparato utilizado para estudiar el efecto fotoeléctrico. El voltaje V se puede variar en magnitud de manera continua y también es posible, mediante el interruptor, invertir el signo.

Si se invierte el signo de V, la corriente fotoeléctrica no cae inmediatamente a cero, lo cual sugiere que los electrones son emitidos desde A con energía cinética; algunos alcanzarán el punto B sin importar que el campo eléctrico se oponga a su movimiento. Sin embargo, si esta diferencia de potencial se hace lo suficientemente grande se alcanzará un valor V_0 para el cual la corriente fotoeléctrica se hace igual a cero, a este valor se le llama *potencial de frenamiento*. Esta diferencia de potencial V_0 multiplicada por la carga del electrón es una medida de la energía cinética $K_{\text{máx}}$ de los fotoelectrones *más rápidos*. Es decir

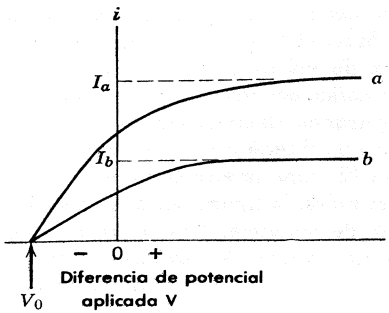
$$K_{\text{máx}} = eV_0 \tag{2-1}$$

Experimentalmente resulta que la cantidad $K_{\text{máx}}$ es independiente de la intensidad de la luz tal como la muestra la curva b de la figura 2-2 en la cual la intensidad de la luz se ha reducido a la mitad del valor utilizado para obtener la curva a.

La figura 2-3 muestra el potencial de frenamiento V_0 como función de la frecuencia de la luz que incide sobre el sodio. Obsérvese que existe una frecuencia de *corte* (ν_0) bien definida, por

FIGURA 2-2

Gráficas de la corriente I como función del voltaje V según los datos tomados con el aparato de la figura 2-1. La diferencia de potencial V se considera positiva cuando la copa B de la figura 2-1 es positiva con respecto a la superficie fotoeléctrica. En la curva b la intensidad de la luz incidente se ha reducido a la mitad de la de la curva a. El potencial de frenamiento V_0 es independiente de la intensidad de la luz pero las corrientes de saturación I_a e I_b son directamente proporcionales a él.



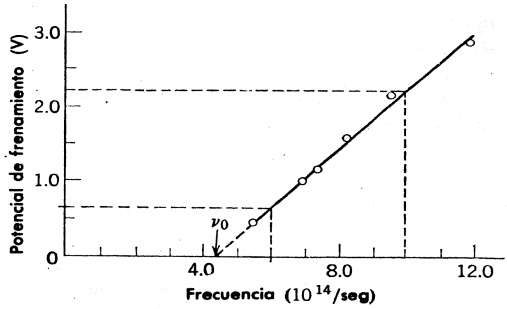


FIGURA 2-3

Gráfica de las medidas realizadas por Millikan para el potencial de frenamiento en función de la frecuencia para el caso del sodio. La frecuencia de corte ν_0 es 4.39×10^{14} Hz.

debajo de la cual no ocurre el efecto fotoeléctrico. Estos datos fueron tomados en 1914 por Millikan, quien por su esmerado trabajo sobre el efecto fotoeléctrico se hizo acreedor al premio Nobel de 1923. Debido a que el efecto fotoeléctrico para luz en el visible, o en el visible cercano es un fenómeno fundamentalmente de superficie, es necesario evitar en los experimentos capas de óxido, grasa o cualquier otro contaminante de la superficie.

Existen tres hechos fundamentales del efecto fotoeléctrico que no pueden explicarse en términos de la teoría clásica ondulatoria de la luz:

1. La teoría ondulatoria exige que el vector eléctrico oscilante **E** de la onda luminosa aumente en amplitud conforme aumenta la intensidad del haz luminoso. Puesto que la fuerza aplicada al electrón es $e\mathbf{E}$, se sugiere que la energía cinética de los fotoelectrones también debería aumentar de acuerdo con el aumento en intensidad del haz luminoso. Sin embargo, la figura 2-2 muestra que $K_{\max}$, que es igual a eV_0 *es independiente de la intensidad de la luz.* Esto ha sido probado sobre un intervalo de intensidades de 10^7.

2. Según la teoría ondulatoria, el efecto fotoeléctrico debería ocurrir para cualquier frecuencia de la luz tomando en cuenta solamente que la intensidad de la luz sea lo suficientemente intensa como para dar la energía necesaria para emitir los fotoelectrones. Sin embargo, la figura 2-3 muestra que para cada superficie existe una *frecuencia de corte característica* ν_0. *Para frecuencias menores de* ν_0, *el efecto fotoeléctrico no ocurre, sin importar qué tan intensa sea la iluminación.*

3. Si la energía adquirida por un fotoelectrón es absorbida de la onda que incide sobre la placa de metal, el "área efectiva del blanco" para un electrón en un metal está limitada y probablemente no sea mucho mayor que un círculo de un diámetro atómico. En la teoría clásica la energía luminosa se encuentra uniformemente distribuida sobre el frente de onda. Entonces, si la luz es suficientemente débil existirá un tiempo de retraso mensurable entre el instante en que la luz empieza a incidir sobre la superficie y la expulsión del fotoelectrón, que se estimará en el ejemplo 2-1. Durante este intervalo el electrón deberá absorber energía del haz hasta acumular la suficiente para escapar. *Sin embargo, nunca se ha medido un tiempo de retraso mensurable.* Este desacuerdo es particularmente interesante cuando la substancia fotoeléctrica es un gas, bajo estas circunstancias pueden aparecer mecanismos de absorción colectiva y la energía del fotoelectrón emitido deberá ser extraída del haz luminoso por un solo átomo o molécula.

Ejemplo 2-1. A una distancia de un metro de una fuente luminosa cuya potencia es 1 W = 1 joule/seg se coloca una placa de potasio. Supóngase que un fotoelectrón emitido puede recibir su energía de un área circular de la placa cuyo radio r es, por ejemplo, un radio atómico: $r \simeq 1 \times 10^{-10}$ m. La energía necesaria para extraer un electrón de la superficie del potasio es aproximadamente 2.1 eV = 3.4×10^{-19} joule (un electronvolt = 1 eV = 1.60×10^{-19} joules es la energía ganada por un electrón de carga $1.6 \times$

10^{-19} coulombs. que cae a través de una diferencia de potencial de 1 V). ¿Cuánto tiempo le tomaría a este blanco absorber esta cantidad de energía de la fuente luminosa? Supóngase que la energía luminosa está esparcida uniformemente sobre el frente de onda.

El área del blanco es $\pi r^2 = \pi \times 10^{-20}\ \mathrm{m}^2$. El área de una esfera de un metro con centro en la fuente es $4\pi(1\ \mathrm{m})^2 = 4\pi\ \mathrm{m}^2$. Entonces, si la fuente radía uniformemente en todas direcciones (es decir, si la energía está uniformemente distribuida sobre frentes de onda esféricos que emergen desde la fuente, según la teoría clásica) la razón R a la cual la energía cae sobre el blanco está dada por

$$R = 1\ \mathrm{joule/seg} \times \frac{\pi \times 10^{-20}\ \mathrm{m}^2}{4\pi\ \mathrm{m}^2} = 2.5 \times 10^{-21}\ \mathrm{joule/seg}$$

Suponiendo que toda esta potencia se absorbe, se puede calcular el tiempo necesario para que los electrones adquieran energía suficiente para escapar; por lo tanto

$$t = \frac{3.4 \times 10^{-19}\ \mathrm{joule}}{2.5 \times 10^{-21}\ \mathrm{joule/seg}} = 1.4 \times 10^{2}\ \mathrm{seg} \simeq 2\ \mathrm{min}$$

Por supuesto, se podría modificar la descripción anterior con objeto de reducir el tiempo calculado suponiendo una mayor área efectiva del blanco. La suposición más favorable, que la energía se transfiere de la onda luminosa al electrón mediante un proceso resonante, conduce a una área del blanco de λ^2, donde λ es la longitud de onda de la luz, pero se podría obtener un tiempo de retraso finito que estaría dentro de nuestra habilidad experimental para medir, por ejemplo $\lambda = 100$ Å, segundos. (Para luz ultravioleta de $t \simeq 10^{-2}$ seg Sin embargo, no se ha detectado ningún tiempo de retraso bajo ninguna circunstancia y los primeros experimentos fijaron un límite superior de 10^{-9} segundos sobre cualquier retraso posible. ◀

2.3 Teoría cuántica de Einstein del efecto fotoeléctrico

En 1905 Einstein puso en duda la teoría clásica de la luz, propuso una nueva teoría y citó el efecto fotoeléctrico como una de las aplicaciones que podría probar cuál teoría era la correcta. Esto fue enunciado muchos años antes al trabajo de Millikan, pero Einstein estaba influenciado por el experimento de Lenard. Como ya se ha mencionado, originalmente Planck restringió su concepto de cuantización de la energía al electrón radiante en las paredes de una cavidad de cuerpo negro; Planck pensaba que la energía electromagnética una vez radiada se esparcía en el espacio de la misma manera que las ondas de agua se esparcen en ella. En vez de esto, Einstein propuso que la energía radiante estaba cuantizada en paquetes concentrados a los cuales posteriormente se les llamó *fotones*.

Einstein argumentaba que los experimentos ópticos tan bien conocidos sobre interferencia y difracción de radiación electromagnética solamente se habían efectuado en situaciones en las cuales el número de fotones era muy grande. Estos experimentos dan resultados que son promedios de los comportamientos de los fotones individuales. En estos experimentos la presencia de los fotones no se manifiesta, como tampoco lo hacen las gotas de agua individuales en un rocío fino proveniente de una manguera de jardín si el número de gotas es muy grande. Por supuesto que los experimentos sobre interferencia y difracción muestran de manera definitiva que los fotones no viajan desde donde son emitidos hasta donde son absorbidos en la forma simple en que lo hacen las partículas clásicas tales como las gotas de agua. Viajan como ondas clásicas en el sentido de que los cálculos que se basan en la forma en la que se propagan las ondas (y en particular la forma en que dos ondas se refuerzan o nulifican entre sí dependiendo de sus fases relativas) explican correctamente las medidas del modo en el que viajan los fotones promedio.

Einstein no enfocó su atención en la forma ondulatoria de propagación de la radiación, sino que primero pensó en la forma en la cual se emiten y absorben los corpúsculos. Pensó que el requisito de Planck acerca de que la energía contenida en las ondas electromagnéticas de

frecuencia ν es una fuente radiante (por ejemplo una fuente de luz ultravioleta en un experimento fotoeléctrico) sólo podía ser cero, o $h\nu$, o $2h\nu$,... o $nh\nu$,.. implicaba que en el proceso de ir de un estado de energía $nh\nu$ a un estado de energía $(n - 1)\ h\nu$ la fuente debería emitir pulsos de energía electromagnética discretos con contenido energético $h\nu$.

Einstein supuso que dicho paquete de energía está localizado inicialmente en un volumen de espacio pequeño y que se mantiene localizado mientras se mueve apartándose de la fuente con velocidad c. Supuso que la cantidad de energía E del paquete o fotón está relacionada con su frecuencia ν mediante la ecuación

$$E = h\nu \tag{2-2}$$

También supuso que en el proceso fotoeléctrico un fotón es completamente absorbido por un electrón del fotocátodo.

Cuando se emite un electrón desde la superficie del metal, su energía cinética es

$$K = h\nu - w \tag{2-3}$$

donde $h\nu$ es la energía del fotón incidente absorbido y w es el trabajo necesario para sacar al electrón del metal. Este trabajo es el necesario para superar tanto los campos atractivos de los átomos en la superficie, como las pérdidas de energía cinéticas debidas a las colisiones internas del electrón. Algunos de los electrones están ligados más fuertemente que otros y algunos pierden energía en colisiones durante el trayecto; en el caso en el que el enlace sea el más débil y no existan pérdidas internas, el fotoelectrón emergerá con la energía cinética máxima $K_{\max}$. Por lo tanto,

$$K_{\max} = h\nu - w_0 \tag{2-4}$$

donde w_0 que es una energía característica del metal denominada la *función trabajo* es la energía mínima necesaria para que el electrón pase a través de la superficie del metal y escape a las fuerzas atractivas que normalmente fijan el electrón al metal.

Ahora se contemplará la manera en la que la hipótesis de Einstein acerca del fotón encara las tres objeciones manifestadas en contra de la interpretación que la teoría ondulatoria hace del efecto fotoeléctrico. Respecto a la primera objeción (la falta de dependencia de $K_{\max}$ con la intensidad de iluminación), existe completa concordancia entre la teoría del fotón y el experimento, puesto que duplicando la intensidad de la luz simplemente se duplica el número de fotones y por ende la corriente fotoeléctrica; esto no cambia la energía $h\nu$ de los fotones individuales o la naturaleza del proceso fotoeléctrico individual descrito por (2-3).

Según la ecuación (2-4) la objeción 2 (la existencia de una frecuencia de corte) desaparece. Si $K_{\max}$ es igual a cero se tiene

$$h\nu_0 = w_0 \tag{2-5}$$

lo cual asevera que un fotón de frecuencia ν_0 tiene justamente la energía suficiente para extraer los fotoelectrones y nada extra que aparezca como energía cinética. Si la frecuencia se reduce por debajo de ν_0, los fotoelectrones individuales, sin importar cuántos haya, (esto es, sin importar la intensidad de la iluminación) no tendrán individualmente energía suficiente para extraer fotoelectrones.

En la teoría del fotón se hace a un lado la objeción 3 (la ausencia de un tiempo de retraso), debido a que la energía necesaria se suministra en paquetes concentrados y *no* se esparce uniformemente sobre un área grande como se supuso en el ejemplo 2-1, el cual está basado en la suposición de que la teoría ondulatoria clásica es cierta. Si existe cualquier iluminación incidiendo sobre el cátodo, entonces existirá cuando menos un fotón que colinda con él y este fotón será absorbido inmediatamente por *algún* átomo resultando de inmediato en la emisión de un fotoelectrón.

Se volverá a escribir la ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico, (2-4), substituyendo eV_0 por K_{max} de la ecuación (2-1). Se tiene

$$V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{w_0}{e}$$

Por lo tanto la teoría de Einstein predice una relación lineal entre el potencial de frenamiento V_0 y la frecuencia ν en completa concordancia con los resultados experimentales que se muestran en la figura 2-3. La pendiente de la curva experimental en la figura debe ser h/e, o

$$\frac{h}{e} = \frac{2.20\text{ V} - 0.65\text{ V}}{10.0 \times 10^{14}/\text{seg} - 6.0 \times 10^{14}/\text{seg.}} = 3.9 \times 10^{-15}\text{ V-seg}$$

Multiplicando esta relación por la carga electrónica e es posible determinar h, resultando $h = 3.9\ 10^{-15}$ V-seg $\times$ 1.6×10^{-19} coul $= 6.2 \times 10^{-34}$ joule seg. De un análisis más cuidadoso y de estos y otros datos incluyendo algunos tomados con superficies de litio, Millikan encontró el valor $h = 6.57 \times 10^{-34}$ joules-seg con una precisión de aproximadamente 0.5%. Este resultado se ajusta con el valor de h derivado a partir de la fórmula de la radiación de Planck. El acuerdo numérico en dos determinaciones de h usando fenómenos y teorías completamente diferentes es sorprendente. Un valor de h obtenido recientemente partiendo de diversos experimentos es

$$h = 6.6262 \times 10^{-34}\text{ joule-seg}$$

Citando a Millikan: "El efecto fotoeléctrico... constituye una prueba que es totalmente independiente de los hechos de la radiación del cuerpo negro, de la validez de la suposición fundamental de la teoría cuántica, a saber la suposición de una emisión discontinua o explosiva de la energía absorbida por los constituyentes electrónicos de los átomos de las. . . ondas. Materializa, por así decirlo, la cantidad h descubierta por Planck mediante el estudio de la radiación del cuerpo negro y nos proporciona una confianza de que la concepción física fundamental que sustenta el trabajo de Planck corresponde a la realidad, confianza que no nos inspira ningún otro tipo de fenómeno".

Ejemplo 2-2. A partir de la figura 2-3 deducir la función trabajo del sodio.

La intersección de la recta con el eje horizontal es la frecuencia de corte $\nu_0 = 4.39 \times 10^{14}$/seg que substituido en (2-5) resulta en

$$\begin{aligned} w_0 = h\nu_0 &= 6.63 \times 10^{-34}\text{ joule-seg} \times 4.39 \times 10^{14}/\text{seg} \\ &= 2.92 \times 10^{-19}\text{ joule} \times \frac{1\text{ eV}}{1.60 \times 10^{-19}\text{ joule}} \\ &= 1.82\text{ eV} \end{aligned}$$

De la figura 2-3 se obtiene este mismo valor si se observa la intersección de la prolongación de la recta con el eje vertical. Sin embargo, los experimentos modernos dan un valor ligeramente mayor, 2.27 eV.

Para la mayoría de los metales conductores el valor de la función trabajo es del orden de unos cuantos electrónvolts; valor que es el mismo que el de la función trabajo para emisión termoiónica de estos metales. ◀

Ejemplo 2-3. ¿Cuál es la razón por unidad de área con la cual los electrones inciden sobre la placa de metal del ejemplo 2-1? Suponga que la luz es monocromática de longitud de onda 5890 Å (luz amarilla).

La razón por unidad de área con la cual caen los electrones sobre una placa de metal que dista 1 m de una fuente luminosa de un 1-W, es (ver ejemplo 2-1)

$$\begin{aligned} R = \frac{1\text{ joule/seg}}{4\pi(1\text{ m})^2} &= 8.0 \times 10^{-2}\text{ joule/m}^2\text{-seg} \\ &= 5.0 \times 10^{17}\text{ eV/m}^2\text{-seg} \end{aligned}$$

Cada fotón tiene una energía

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\ \text{joule-seg} \times 3.00 \times 10^{8}\ \text{m/seg}}{5.89 \times 10^{-7}\ \text{m}}$$

$$= 3.4 \times 10^{-19}\ \text{joule}$$

$$= 2.1\ \text{eV}$$

Por lo tanto, la razón R con la cual los fotones inciden sobre un área unitaria de la placa es

$$R = 5.0 \times 10^{17}\ \text{eV/m}^2\text{-seg} \times \frac{1\ \text{fotones}}{2.1\ \text{eV}} = 2.4 \times 10^{17}\ \frac{\text{fotones}}{\text{m}^2\text{-seg}}$$

La razón por la cual se presenta la posibilidad de que ocurra el efecto fotoeléctrico es que la energía del fotón es justamente 2.1 eV, que coincide con la función de trabajo para la superficie del potasio (ver ejemplo 2-1-. Obsérvese, que si se incrementa ligeramente la longitud de onda (es decir si ν se disminuye ligeramente) no se presentará efecto fotoeléctrico, sin importar cuán grande sea la razón R.

Este ejemplo sugiere que la intensidad de la luz I se puede considerar como el producto de N, el número de fotones por unidad de área por unidad de tiempo, y $h\nu$, la energía de un solo fotón. Se ve que aún a intensidades relativamente bajas($\simeq 10^{-1}$ W/m^2)el número N es extremadamente grande ($\simeq 10^{17}$ fotones/m^2-seg) de manera que la energía para uno cualquiera de los fotones es muy pequeña. Esto da cuenta de la fineza extremada de la granularidad de la radiación y sugiere el por qué ordinariamente es tan difícil el detectarla. Esto es análogo a detectar la estructura atómica de la materia, la cual para la mayoría de los propósitos se puede considerar como contínua; su carácter discreto se pone de manifiesto solamente bajo circunstancias especiales. ◀

En 1921 Einstein recibió el premio Nobel por la predicción teórica que hizo de la ley del efecto fotoeléctrico. Antes de que Millikan completara la confirmación experimental de esta ley (1914), Einstein fur recomendado por Planck y otros para ingresar como miembro en la Academia de Ciencias de Prusia. Su actitud negativa inicial acerca de la hipótesis del fotón se patentiza en su declaración firmada en elogio de Einstein, en la cual ellos escriben: "resumiendo, podemos decir que difícilmente existe entre los grandes problemas, en los que la física moderna es tan rica, uno al que Einstein no haya hecho una contribución importante. El que algunas veces haya perdido el objetivo en sus especulaciones, como por ejemplo en su hipótesis sobre los quanta de luz (fotones), realmente no dice mucho en su contra porque no es posible introducir ideas fundamentalmente nuevas aun en la más exacta de las ciencias sin correr ocasionalmente un riesgo".

En la actualidad la hipótesis del fotón se usa en todo el espectro electromagnético y no sólo en la región luminosa (véase figura 2-4). Por ejemplo, se puede decir que una cavidad de microondas contiene fotones. Para $\lambda = 10$ cm, una longitud de onda típica de microondas, se puede calcular que la energía del fotón es 1.20×10^{-5} eV. Esta energía es demasiado pequeña para extraer fotoelectrones de superficies metálicas. Para rayos X o para rayos λ energéticos tales como los emitidos por núcleos radiactivos la energía del fotón puede ser de 10^6 eV o más. Esos fotones pueden extraer electrones internos ligados a átomos pesados con energías del orden de 10^5 eV. Los fotones en la región visible del espectro electromagnético no son lo suficientemente energéticos como para hacer esto, los fotoelectrones que ellos extraen provienen de los llamados electrones de *conducción* los cuales están ligados al metal con energías de unos cuantos electrónvolts.

Obsérvese que en el proceso fotoeléctrico los fotones son absorbidos, lo cual exige que los electrones estén ligados a los átomos o en sólidos, ya que un electrón realmente libre no puede absorber un fotón y conservar en el proceso, tanto su energía relativista total como su impulso. Por lo tanto, se deberá tener un electrón ligado de manera que las fuerzas de ligadura sirvan para transmitir el impulso al átomo o al sólido. Debido a la gran masa de un átomo o un sólido, comparada con la del electrón, el sistema puede absorber una gran cantidad de impulso sin adquirir una apreciable cantidad de energía. La ecuación de energía en el efecto fotoeléctrico

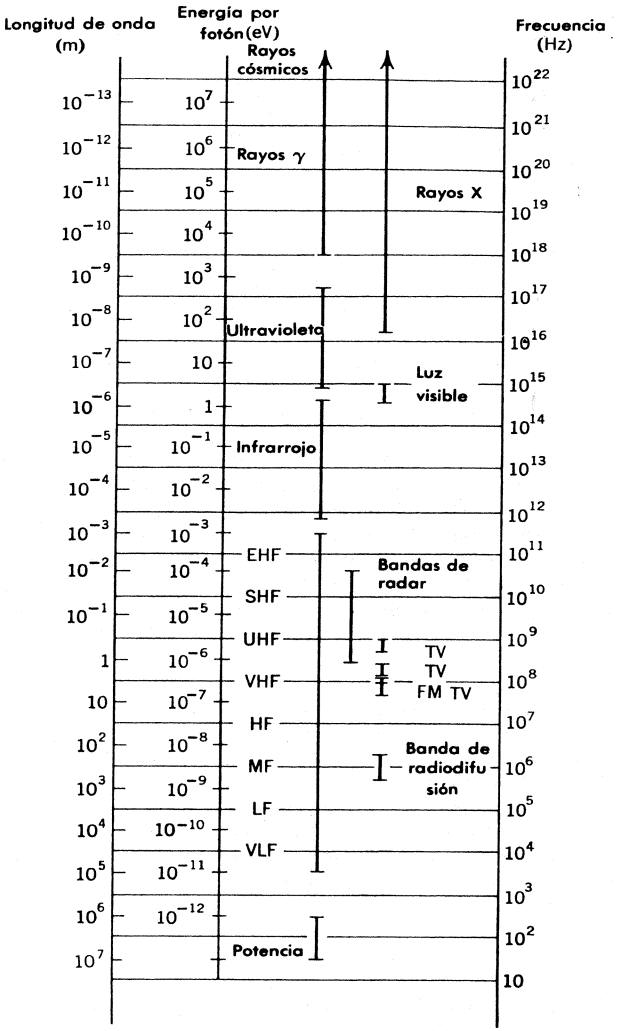


FIGURA 2-4

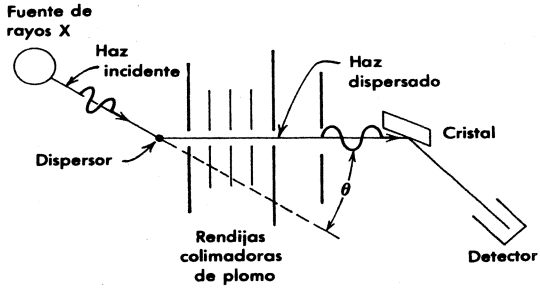
El espectro electromagnético mostrando la longitud de onda, la frecuencia y la energía por fotón sobre una escala logarítmica.

sigue siendo válida, el efecto sigue siendo posible sólo porque existe una partícula pesada que retrocede además de un electrón emitido. El efecto fotoeléctrico es una forma importante en la cual los fotones, de energías comparables con las de los rayos X o superiores, son absorbidas por la materia. A energías mayores resultan más importantes otros procesos de absorción de fotón tal como se verá posteriormente.

Por último, se debe hacer énfasis que en el modelo de Einstein un fotón de frecuencia ν tiene exactamente la energía $h\nu$ y *no* tiene energías que sean múltiplos enteros de $h\nu$. Por supuesto que puede haber n fotones de frecuencia ν de tal manera que la energía a tal frecuencia puede

FIGURA 2-5

Arreglo experimental utilizado por Compton. Los rayos X monocromáticos de longitud de onda λ inciden sobre un dispersor de grafito. La distribución de intensidades respecto a la longitud de onda se mide mediante los rayos X dispersados para cualquier ángulo de dispersión θ . Las longitudes de onda dispersadas se miden observando las reflexiones de Bragg del cristal (ver fig. 3-3). Sus intensidades se miden mediante un detector tal como una cámara de ionización.



ser *nhv*. En el tratamiento de la radiación de la cavidad de cuerpo negro según el modelo de Einstein se trabaja con un "gas de fotones". Debido a que la energía radiante está localizada en el espacio en paquetes en vez de estar extendida a través del espacio en ondas estacionarias. Años después de la deducción de Planck de la fórmula para la radiación de la cavidad, Bose y Einstein derivaron la misma fórmula trabajando con un gas de fotones.

2.4 El efecto Compton

En el año de 1923 la naturaleza corpuscular de la radiación recibió una confirmación dramática proveniente de los experimentos de Compton. Como se muestra en la figura 2-5, Compton permitía que un haz de rayos X de longitud de onda λ perfectamente definida incidiera sobre un blanco de grafito. Para varios ángulos de dispersión, medía la intensidad de los rayos X dispersados como una función de su longitud de onda y sus resultados experimentales se muestran en la figura 2-6. Se observa que no obstante que el haz incidente consiste esencialmente de una sola longitud de onda λ , los rayos X dispersados tienen picos de intensidad para *dos* longitudes de onda; una de las cuales es la misma longitud de onda incidente y la otra, λ' , es mayor por una cantidad $\Delta\lambda$. Este corrimiento, llamado *corrimiento Compton*, $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ varía con el ángulo al que se observan los rayos X dispersados.

La presencia de una longitud de onda dispersada λ' no es posible entenderla si se considera a la radiación x incidente como una onda electromagnética clásica. En el modelo clásico, el vector oscilante de campo eléctrico en la onda incidente de frecuencia ν actúa sobre los electrones libres del blanco y los pone a oscilar a la misma frecuencia. Estos electrones oscilantes, como las cargas que van y vienen en una pequeña antena transmisora de radio, radían ondas electromagnéticas que tienen nuevamente esta misma frecuencia ν. Por lo tanto, en el modelo clásico la onda dispersada deberá tener la misma frecuencia ν y la misma longitud de onda λ que la onda incidente.

Compton (y Debye en forma independiente) interpretó su resultado experimental postulando que el haz de rayos X incidente no era una onda de frecuencia ν sino una colección de fotones cada uno de los cuales con energía $E = h\nu$ y que estos fotones chocaban con los electrones libres del blanco dispersor de manera similar a la colisión entre bolas de billar. Según este punto de vista, los fotones de "retroceso" que emergen del blanco constituyen la radiación dispersada. Puesto que el fotón incidente transfiere algo de su energía al electrón con el cual choca, el fotón dispersado deberá tener una energía menor E'; y por lo tanto deberá tener una frecuencia menor $\nu' = E'/h$, lo cual implica una longitud de onda mayor $\lambda' = c/\nu'$. Esto viene a dar cuenta de manera cualitativa del corrimiento en longitud de onda $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$. Obsérvese que en la interacción se considera a los rayos X como partículas y no como ondas y que a diferencia de su comportamiento en el proceso fotoeléctrico los fotones de rayos X son

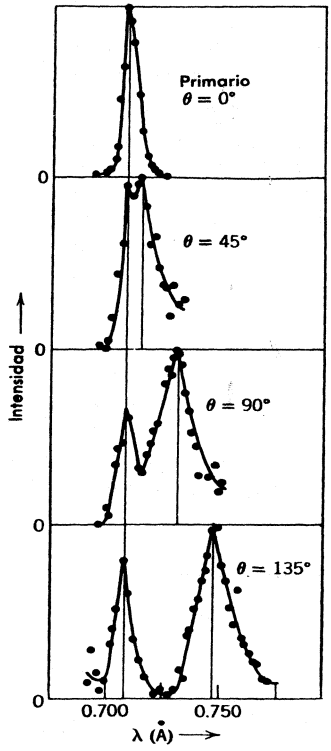


FIGURA 2-6

Resultados experimentales de Compton. La línea continua vertical de la izquierda corresponde a la longitud de onda λ, y la de la derecha a λ'. Se muestran los resultados para cuatro distintos ángulos de dispersión (θ). Obsérvese que el corrimiento Compton $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$, para $\theta = 90°$, concuerda con la predicción teórica. 0.0243 Å.

dispersados en vez de ser absorbidos. Analicemos ahora cuantitativamente una sola colisión fotón-electrón.

Para una radiación x de frecuencia ν la energía de un fotón en el haz incidente es

$$E = h\nu$$

Tomando literalmente la idea de un fotón como un paquete de energía localizado, habrá que considerarlo como una partícula de energía E e impulso p; sin embargo, tal partícula deberá tener propiedades muy especiales. Considérese la ecuación (ver apéndice A) que da la energía relativista total de una partícula en términos de su masa en reposo m_0 y su velocidad v.

$$E = m_0c^2/\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Puesto que la velocidad de un fotón es igual a c y puesto que su contenido energético $E = h\nu$ es finito, resulta evidente que la masa en reposo de un fotón deberá ser cero. Por lo tanto, se puede considerar al fotón como una partícula de masa en reposo cero y de energía total relativista E la cual es por completo energía cinética. El impulso de un fotón se puede evaluar de la relación general entre la energía relativista total E, el impulso p y la masa en reposo m_0. Es decir,

$$E^2 = c^2p^2 + (m_0c^2)^2 \tag{2-6}$$

Para un fotón, el segundo término del segundo miembro es igual a cero y entonces se tiene

$$p = E/c = h\nu/c \tag{2-7}$$

o

$$p = h/\lambda \tag{2-8}$$

donde $\lambda = c/\nu$ es la longitud de onda de la radiación electromagnética que constituye al fotón. Resulta interesante observar que la teoría ondulatoria clásica de Maxwell para la radiación electromagnética conduce también a una ecuación $p = E/c$, en la que p representa el impulso de la radiación por unidad de volumen y E representa su energía por unidad de volumen.

Se observa que la frecuencia ν de la radiación dispersa es independiente del material blanco, lo cual implica que la dispersión no involucra átomos completos. Compton supuso que la dispersión era debida a las colisiones entre el fotón y un electrón individual en el blanco, también supuso que los electrones que participan en este proceso de dispersión son electrones libres e inicialmente estacionarios. Se pueden encontrar justificaciones *a priori* a estas suposiciones considerando el hecho de que la energía de un fotón de rayos X es mayor que la energía de un fotón ultravioleta en varios órdenes de magnitud y de la discusión del efecto fotoeléctrico resulta evidente que la energía de un fotón ultravioleta es comparable a la energía mínima con la cual un electrón está ligado en un metal.

Considérese, como en la figura 2-7, una colisión entre un fotón y un electrón libre estacionario. En el diagrama de la izquierda se muestra un fotón de energía relativista E_0 e impulso p_0 que incide sobre un electrón estacionario de energía en reposo m_0c^2. En el diagrama de la derecha el fotón ha sido dispersado a un ángulo θ y se mueve con energía relativista total E_1 e impulso p_1 mientras que el electrón retrocede a un ángulo φ con energía cinética K e impulso p. Compton aplicó la conservación del impulso y de la energía relativista total a este problema de colisiones. Y utilizó ecuaciones relativistas ya que el fotón siempre se mueve con velocidades relativistas y el electrón que retrocede también se mueve, en la mayoría de los casos, bajo estas circunstancias.

La conservación del impulso exige

$$p_0 = p_1 \cos\theta + p \cos\varphi$$

y

$$p_1 \operatorname{sen}\theta = p \operatorname{sen}\varphi$$

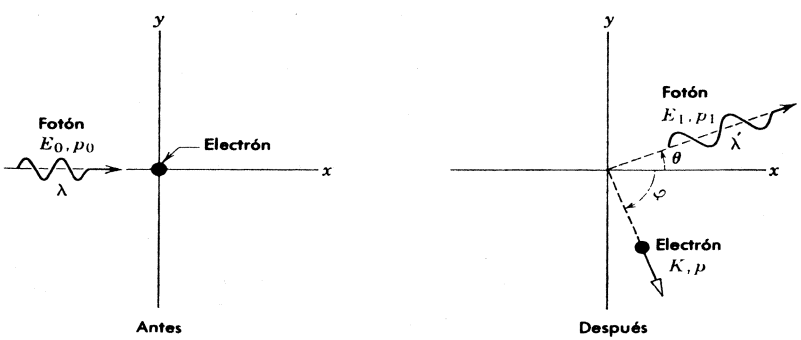


FIGURA 2-7

Interpretación de Compton. Un fotón de longitud de onda λ incide sobre un electrón libre en reposo. En la colisión el fotón es dispersado a un ángulo θ con una longitud de onda mayor λ' mientras que el electrón emerge a un ángulo φ.

Elevando al cuadrado estas dos ecuaciones se obtiene

$$(p_0 - p_1 \cos\theta)^2 = p^2 \cos^2\varphi$$

y

$$p_1^2 \operatorname{sen}^2\theta = p^2 \operatorname{sen}^2\varphi$$

y sumando

$$p_0^2 + p_1^2 - 2p_0p_1 \cos\theta = p^2 \tag{2-9}$$

La conservación de la energía relativista total requiere

$$E_0 + m_0c^2 = E_1 + K + m_0c^2$$

entonces

$$E_0 - E_1 = K$$

Y de acuerdo con (2-7), se tiene

$$c(p_0 - p_1) = K \tag{2-10}$$

Si en la ecuación (2-6) se escribe $K + m_0c^1$ en vez de E se obtiene

$$(K + m_0c^2)^2 = c^2p^2 + (m_0c^2)^2$$

Que se simplifica a

$$K^2 + 2Km_0c^2 = c^2p^2$$

o

$$K^2/c^2 + 2Km_0 = p^2$$

Evaluando p^2 de (2-9) y K de (2-10) se obtiene

$$(p_0 - p_1)^2 + 2m_0c(p_0 - p_1) = p_0^2 + p_1^2 - 2p_0p_1 \cos\theta$$

que se reduce a

$$m_0c(p_0 - p_1) = p_0p_1(1 - \cos\theta)$$

o

$$\frac{1}{p_1} - \frac{1}{p_0} = \frac{1}{m_0c}(1 - \cos\theta)$$

Multiplicando por h y utilizando (2-8), se obtiene la *ecuación de Compton*

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_C(1 - \cos\theta) \tag{2-11}$$

donde

$$\lambda_C \equiv h/m_0c = 2.43 \times 10^{-12}\ \text{m} = 0.0243\ \text{Å} \tag{2-12}$$

es la llamada *longitud de onda de Compton.*

Obsérvese que el *corrimiento Compton* $\Delta\lambda$, sólo depende del ángulo de dispersión θ y *no* de la longitud de onda inicial λ. La ecuación (2-11) predice los corrimientos Compton de la figura 2-6 observados experimentalmente dentro de los límites de la precisión experimental. Según (2-

11) $\Delta\lambda$ varía desde cero (para $\theta = 0$ que corresponde a una colisión "rasante" en la que el fotón incidente apenas si se deflecta) hasta $2h/m_0c = 0.049$ Å (para $\theta = 180^0$ que corresponde a una colisión de "frente" en la que el fotón incidente regresa por la misma dirección por donde vino). La figura 2-8 es una gráfica de $\Delta\lambda$ contra θ.

En experimentos subsecuentes (realizados por Compton, Simon, Wilson, Bothe, Geiger y Blass) se detectó el electrón de retroceso resultante, mostrando que éste aparece simultáneamente con los rayos X dispersados y confirmando cuantitativamente la predicción de la energía y dirección del electrón disperso.

Aún deberá explicarse la presencia de un pico en la figura 2-6 para el cual la longitud de onda del fotón no cambia en la dispersión. Hasta aquí se ha supuesto que el electrón con el cual el fotón choca es un electrón libre. Esta suposición es justificable aun cuando el electrón esté ligado inicialmente, si la energía cinética que adquiere éste durante la colisión es mucho mayor que su energía de enlace. Si el electrón está fuertemente ligado a un átomo del blanco o si la energía del fotón incidente es muy pequeña, existe alguna posibilidad de que el electrón no sea expulsado del átomo; en tal caso se puede considerar que la colisión tiene lugar entre el fotón y el átomo completo. La coraza iónica a la cual está ligado el electrón en el dispersor blanco retrocede como un todo durante la colisión, entonces la masa M del átomo es la masa característica del proceso y deberá substituirse por la masa del electrón m_0 en las ecuaciones de corrimiento de Compton. Puesto que $M \gg m_0$ ($M \simeq 22{,}000\ m_0$ para el carbón, por ejemplo) el corrimiento Compton para colisiones con electrones fuertemente ligados es, como se puede ver de (2-11) y (2-12) inconmensurablemente pequeño (una millonésima de Angstrom para el carbón) de tal manera que el fotón dispersado no modifica su longitud de onda esencialmente. En resumen, algunos fotones son dispersados por electrones que a su vez son liberados por la colisión; estos fotones modifican su longitud de onda, por otra parte, hay otros fotones que son dispersados por electrones que permanecen ligados durante la colisión; en estos fotones no se modifica su longitud de onda.

Al proceso de fotones dispersados sin cambio en su longitud de onda se le llama *dispersión Thomson* en honor del físico que desarrolló la teoría clásica de la dispersión de rayos X por átomos, por el año 1900. Thomson consideró los rayos X como un haz de ondas electromagnéticas cuyo campo eléctrico oscilante interactuaba con las cargas de los electrones atómicos del blanco. Esta interacción produce fuerzas sobre los electrones que ocasionan aceleraciones

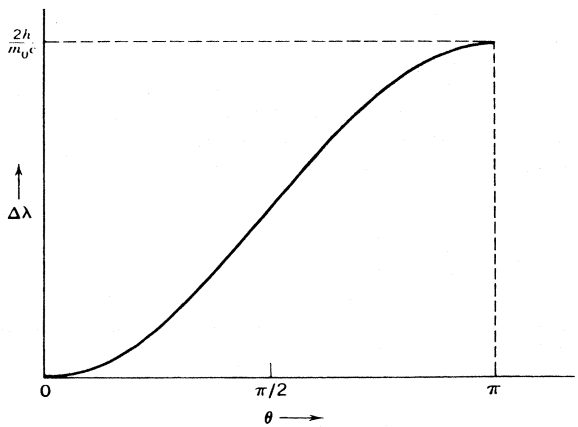


FIGURA 2-8

Resultado de Compton. $\Delta\lambda = (h/m_0c)(1 - \cos\theta)$.

oscilantes; como resultado de las aceleraciones, los electrones radiarán ondas electromagnéticas de la misma frecuencia y en fase con las ondas incidentes, por lo tanto los electrones atómicos absorben energía del haz incidente de rayos X y lo dispersan en todas direcciones sin modificar la longitud de onda. No obstante que esta explicación clásica de la dispersión es diferente a la explicación cuántica presentada en el párrafo anterior, ambas explican los mismos hechos observados en las mediciones. Por lo tanto, la dispersión de Thomson es un caso en el que concuerdan los resultados clásico y cuántico.

Es interesante el preguntar en qué región del espectro electromagnético será dominante el proceso de dispersión Thomson y en cuál el proceso Compton. Si la radiación incidente está en el espectro visible, microondas o radio, λ es extremadamente grande comparada con el corrimiento Compton $\Delta\lambda$, e independientemente, según la ecuación (2-12), de sí se usa un electrón o una masa atómica para evaluar la longitud de onda Compton. Por consiguiente, la radiación dispersada en esta región del espectro tendrá en todas las circunstancias una longitud de onda que es la misma que la longitud de onda de la radiación incidente dentro de la precisión experimental. Así, cuando $\lambda \rightarrow \infty$ los resultados cuántico y clásico coinciden y la dispersión Thomson es la dominante. En la región del espectro que corresponde a los rayos X la dispersión Compton empieza a ser importante particularmente para blancos dispersores de número atómico bajo donde los electrones atómicos no están muy fuertemente ligados y el corrimiento de longitud de onda en la dispersión por un electrón que es liberado en el proceso empieza a ser fácilmente mensurable. En la región de rayos γ en la que $\lambda \rightarrow 0$, la energía del fotón se hace tan grande, que durante la colisión siempre hay un electrón liberado y domina la dispersión Compton.

Los resultados clásicos fallan al explicar la dispersión de radiación en la región de longitudes de onda cortas, como en la catástrofe ultravioleta de la física clásica donde las predicciones acerca de la radiación en una cavidad divergen radicalmente con los resultados experimentales para longitudes de onda cortas. Esto es debido al tamaño de la constante de Planck h. Para longitudes de onda largas la frecuencia ν es muy pequeña y como h también es pequeña la granularidad en la energía electromagnética, $h\nu$, es tan pequeña como para que sea virtualmente indistinguible del continuo de la física clásica. Pero a longitudes de onda suficientemente cortas donde ν es lo suficientemente grande, h ya no es tan pequeña como para ignorar los efectos cuánticos.

Ejemplo 2-4. Considérese un haz de rayos X con $\lambda = 1.000$ Å y también un haz de rayos γ provenientes de una muestra Cs^{137} con $\lambda = 1.88 \times 10^{-2}$ Å. Si la radiación dispersada por los electrones libres se observa a 90° del haz incidente: (a) ¿Cuál es el corrimiento en longitud de onda Compton en cada caso? (b) ¿Qué energía cinética se le comunica al electrón de retroceso en cada caso? (c) ¿Qué porcentaje de la energía del fotón incidente se pierde en la colisión en cada caso?

(a) El corrimiento Compton con $\theta = 90°$, es

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c}(1 - \cos\theta) = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 3.00 \times 10^{8} \text{ m/seg}} \times (1 - \cos 90°)$$
$$= 2.43 \times 10^{-12} \text{ m} = 0.0243 \text{ Å}$$

Este resultado es independiente de la longitud de onda incidente y por lo tanto el mismo para rayos γ y para rayos X.

(b) La ecuación (2-10) se puede escribir como

$$hc/\lambda = hc/\lambda' + K$$

Entonces, puesto que $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$, se tiene

$$hc/\lambda = hc/(\lambda + \Delta\lambda) + K$$

de modo que $K = hc\,\Delta\lambda/\lambda(\lambda + \Delta\lambda)$.
Para el haz de rayos X con $\lambda = 1.00$ Å, se tiene

$$K = \frac{6.63 \times 10^{-34}\text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^{8}\text{ m/seg} \times 2.43 \times 10^{-12}\text{ m}}{1.00 \times 10^{-10}\text{ m} \times (1.00 + 0.024) \times 10^{-10}\text{ m}} = 4.73 \times 10^{-17}\text{ joule}$$
$$= 295\text{ eV} = 0.295\text{ keV}$$

Para el haz de rayos γ con $\lambda = 1.88 \times 10^{-2}$ Å, se tiene

$$K = \frac{6.63 \times 10^{-34}\text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^{8}\text{ m/seg} \times 2.43 \times 10^{-12}\text{ m}}{1.88 \times 10^{-12}\text{ m} \times (0.0188 + 0.0243) \times 10^{-10}\text{ m}} = 5.98 \times 10^{-14}\text{ joule}$$
$$= 378\text{ keV}.$$

(c) La energía del fotón de rayos X incidente es

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^{8}\text{ m/seg}}{1.00 \times 10^{-10}\text{ m}} = 1.99 \times 10^{-15}\text{ joule}$$
$$= 12.4\text{ keV}$$

La energía perdida por el fotón es igual a la energía ganada por el electrón, 0.295 keV, de modo que la pérdida porcentual en energía es

$$\frac{0.295\text{ keV}}{12.4\text{ keV}} \times 100\% = 2.4\%$$

La energía del fotón del rayo γ incidente es

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34}\text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^{8}\text{ m/seg}}{1.88 \times 10^{-12}\text{ m}} = 1.06 \times 10^{-13}\text{ joule}$$
$$= 660\text{ keV}$$

La energía perdida por el fotón es igual a la ganada por el electrón, 378 keV, de modo que la pérdida porcentual en energía es

$$\frac{378\text{ keV}}{660\text{ keV}} \times 100\% = 57\%$$

En consecuencia, los fotones con más contenido energético (los cuales tienen longitudes de onda pequeñas) experimentan una mayor pérdida *porcentual* de energía en la dispersión Compton. Esto corresponde al hecho de que los fotones de longitud de onda menor experimentan un incremento porcentual mayor en su longitud de onda al ser dispersados. Esto resulta evidente de la expresión para la pérdida fraccional en energía, dada simplemente por

$$\frac{K}{E} = \frac{hc\Delta\lambda/\lambda(\lambda + \Delta\lambda)}{hc/\lambda} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda + \Delta\lambda}$$

De esto se puede demostrar que para $\lambda = 5500$ Å, que corresponde a fotones visibles, la pérdida porcentual (para $\theta = 90°$) es menor que un centésimo del 1% mientras que para $\lambda = 1.25 \times 10^{-2}$ Å, que corresponde a fotones de rayos γ de 1 Me V la pérdida porcentual (para $\theta = 90°$) es 67%. ◀

2.5 La naturaleza dual de la radiación electromagnética

En su artículo "teoría cuántica de la dispersión de rayos X por elementos ligeros" Compton escribió: "La presente teoría depende esencialmente de la suposición de que cada electrón que

es efectivo en la dispersión, dispersa un quantum completo (fotón). También involucra la hipótesis de que un quantum de radiación se recibe desde direcciones definidas y se dispersa en direcciones definidas. El soporte experimental de la teoría indica de manera muy convincente que un quantum de radiación lleva consigo su impulso y su energía".

Es obvia la necesidad de interpretación en procesos que tratan de la interacción entre la radiación y la materia para un fotón o partícula localizada; pero al mismo tiempo es necesario una teoría ondulatoria de la radiación para entender los fenómenos de interferencia y difracción. Por consiguiente debe tomarse en serio la idea de que la radiación no es un fenómeno puramente ondulatorio ni es nada más un chorro de partículas. Sea lo que fuere la radiación, ésta se comporta como ondulatoria bajo algunas circunstancias y como corpuscular bajo otras. Efectivamente, esta situación se revela muy claramente en el trabajo experimental de Compton en el que; (a) se usa un espectrómetro de cristal para medir las longitudes de onda de los rayos X y las medidas se interpretan mediante una teoría ondulatoria de la difracción y (b) las dispersiones afectan la longitud de onda de una manera que sólo puede entenderse si se trata a los rayos X como partículas. Es en las expresiones $E=h\nu$ y $p = h/\lambda$ donde se combinan los atributos de las ondas (ν y λ) y los atributos de las partículas (E y p).

Sin embargo, muchos físicos se sintieron muy incómodos cuando contemplaron el "desdoblamiento de personalidad" de la radiación electromagnética, el punto de vista amplio que se ha proporcionado por el desarrollo de la mecánica cuántica ha ocasionado que la actitud contemporánea sea muy diferente. La evidente dualidad en la naturaleza onda-partícula de la radiación ya no se considera tan desusual debido a que ahora se conoce que es una característica general de todos los entes físicos. Se verá por ejemplo que los electrones y los protones tienen exactamente la misma naturaleza dual que los fotones. También se verá que es posible reconciliar la existencia de aspectos ondulatorios con la existencia de aspectos corpusculares para cualesquiera de estos entes con la ayuda de la mecánica cuántica.

2.6 Fotones y emisión de rayos X

Los rayos X, llamados así por su descubridor Roentgen debido a que entonces su naturaleza era desconocida, son radiaciones en el espectro electromagnético de longitudes de onda algo menores que 1.0 Å. Muestran el comportamiento típico de una onda transversal, como polarización, interferencia y difracción que se encuentran en la luz y en todas las otras radiaciones electromagnéticas. Los rayos X se producen en el blanco de un tubo de rayos X como el mostrado en la figura 2-9, cuando un haz de electrones de alta energía, acelerados a través de una diferencia de potencial de miles de volts se frenan al chocar con el blanco. Según la física clásica (ver apéndice B) la desaceleración de los electrones hasta alcanzar el punto de

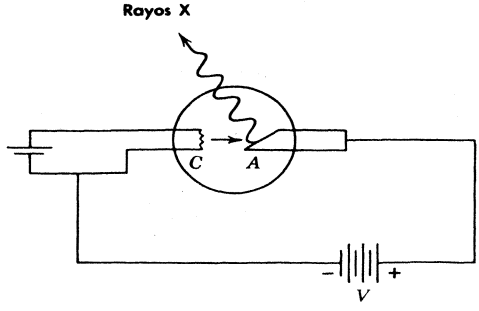


FIGURA 2-9

Tubo de rayos X. Los electrones son emitidos térmicamente desde el cátodo calentado C y se aceleran hacia el ánodo A mediante el potencial aplicado V. Los rayos X se emiten desde A cuando los electrones son detenidos por él.

reposo en el material blanco resulta en la emisión de un espectro contínuo de radiación electromagnética.

La figura 2-10 muestra, para cuatro valores distintos de la energía del electrón incidente, como se distribuyen en longitud de onda los rayos X emitidos desde el blanco de tungsteno. (Además del espectro continuo de rayos X también son emitidas líneas de rayos X características del material blanco. Estas líneas serán analizadas en el capítulo 9). La característica más notable de estas curvas es que para una energía determinada del electrón existe una longitud de onda mínima bien definida λ_{min}; por ejemplo, para electrones de 40 keV, λ_{min} es 0.311 Å. No obstante que la forma de la distribución del espectro continuo de rayos X depende ligeramente del material blanco escogido así como del potencial V que acelera los electrones, el valor de λ_{min} depende sólo de V y es el mismo para todos los materiales blancos. La teoría electromagnética clásica no puede dar cuenta de este hecho ya que no existe razón por la cual ondas cuya longitud de onda es menor que cierto valor crítico no deban salir del blanco.

Sin embargo, existe una explicación si se considera a los rayos X como fotones. La figura 2-11 muestra el proceso elemental que desde el punto de vista del fotón, es responsable del espectro continuo de rayos X que muestra la figura 2-10. Un electrón de energía cinética inicial K es desacelerado durante una colisión con un núcleo pesado, la energía que éste pierde aparece en forma de radiación como un fotón de rayos X. El electrón interactúa con el núcleo cargado mediante el campo de Coulomb y transfiere impulso al núcleo. La desaceleración del electrón produce la emisión del fotón. El núcleo blanco es tan masivo, que la energía que adquiere durante la colisión se puede ignorar sin ningún problema. Si K' es la energía cinética del electrón después del choque, la energía del fotón es entonces

$$h\nu = K - K'$$

y la longitud de onda para el fotón se sigue de

$$hc/\lambda = K - K' \qquad (2\text{-}13$$

Los electrones del haz incidente pueden perder diferentes cantidades de energía en las colisiones y un determinado electrón podrá alcanzar el punto de reposo solamente después de muchas de ellas. Entonces los rayos X producidos por muchos electrones son los que constituyen el espectro continuo de la figura 2-10 y son muchos los fotones discretos cuyas

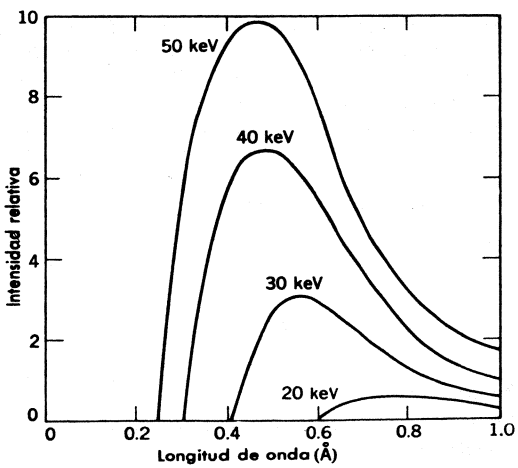


FIGURA 2-10

El espectro continuo de rayos X emitidos por un blanco de tungsteno para cuatro diferentes valores de la energía del electrón incidente (eV).

longitudes de onda varían desde λ_{min} hasta $\lambda \rightarrow \infty$, correspondiendo a las diferentes pérdidas de energía en los choques individuales. El fotón de longitud de onda más corta debería emitirse cuando un electrón pierde toda su energía cinética en un proceso de desaceleración; entonces $K' = 0$ de modo que $K = hc/\lambda_{min}$. Ya que K es igual a eV la energía adquirida por el electrón al acelerarse mediante la diferencia de potencial V aplicada al tubo de rayos X, se tiene

$$eV = hc/\lambda_{min}$$

o

$$\lambda_{min} = hc/eV \tag{2-14}$$

Entonces el mínimo de la longitud de onda de corte representa la conversión completa de la energía cinética del electrón en radiación X. La ecuación 2-14 muestra claramente que si $h \rightarrow 0$ entonces $\lambda_{min} \rightarrow 0$, la cual es la predicción de la teoría clásica. Esto muestra que la existencia de una longitud de onda mínima es un fenómeno cuántico.

Al espectro continuo de radiación X de la figura 2-10 se le llama frecuentemente *bremsstrahlung*, del alemán *bremss* (igual a frenar, es decir, desacelerar) más *strahlung* (igual a radiación). El proceso de bremsstrahlung ocurre no solamente en tubos de rayos X sino en cualquier parte en que los electrones choquen con la materia, como en los rayos cósmicos, en los cinturones de radiación de van Allen que circundan la tierra y en el frenamiento de electrones que emergen de los aceleradores o núcleos radiactivos. El proceso de bremsstrahlung se puede considerar como un efecto fotoeléctrico inverso: en el efecto fotoeléctrico, se absorbe un fotón cuya energía e impulso van al electrón y al núcleo que retrocede; en el proceso de bremsstrahlung se crea un fotón cuya energía e impulso vienen de la colisión de un electrón y un núcleo. En el proceso bremsstrahlung se trata de la *creación* de fotones en vez de su absorción o dispersión por la materia.

Ejemplo 2-5. Determinar la constante de Planck h a partir del hecho de que la longitud de onda mínima de rayos X producida por electrones de 40 keV es $3.11 \times 10^{0}_{11}$ *m*.

De 2.14, se tiene

$$h = \frac{eV\lambda_{min}}{c}$$

$$= \frac{1.60 \times 10^{-19}\ \text{coul} \times 4.00 \times 10^{4}\ \text{V} \times 3.11 \times 10^{-11}\ \text{m}}{3.00 \times 10^{8}\ \text{m/seg}}$$

$$= 6.64 \times 10^{-34}\ \text{joule-seg}$$

Esto está en concordancia con el valor de **h** deducido del efecto fotoeléctrico y del efecto Compton.

Mediciones de V, λ_{min}, y c proporcionan uno de los métodos más precisos para evaluar la relación h/e. En 1951 Bearden, Johnson y Watts en la Universidad Johns Hopkins encontraron usando este procedimiento $h/e = 1.37028 \times 10^{0}_{15}$ joule-seg/coul. Esta relación se combina con muchas otras medidas combinadas de constantes físicas, el conjunto de datos se analiza mediante métodos estadísticos elaborados para encontrar el "mejor" valor para las diferentes constantes físicas. Los mejores valores cambian (pero usualmente sólo dentro de una precisión estimada *a priori*) y se hacen más precisos conforme se tienen mejores datos experimentales. ◀

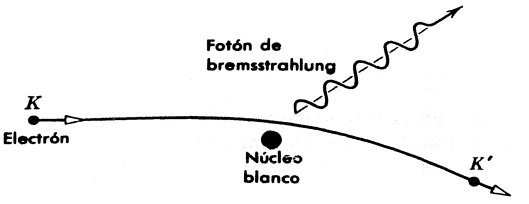


FIGURA 2-11

El proceso de bremsstrahlung responsable de la emisión de rayos X en el espectro continuo.

2.7 Producción y aniquilación de pares

Además de los efectos fotoeléctrico y Compton existe otro proceso mediante el cual los fotones pierden su energía e interacción con la materia, este proceso es el llamado *producción de pares.* La producción de pares también es un ejemplo excelente de la conversión de energía radiante en energía de masa en reposo y energía cinética. En este proceso que se ilustra esquemáticamente en la figura 2-12 un fotón de alta energía pierde toda su energía $h\nu$ en una colisión con un núcleo creando un electrón y un positrón (*el par*) y proporcionándoles energía cinética. Un *positrón* es una partícula que es idéntica en todas sus propiedades a un electrón, excepto en el signo de su carga (y en su momento magnético) que es opuesta a la del electrón; un positrón es un electrón cargado positivamente. En la producción de pares la energía que toma el retroceso del núcleo es despreciable debido a que es muy masivo y por lo tanto el balance de la energía relativista total en el proceso es simplemente

$$h\nu = E_- + E_+ = (m_0c^2 + K_-) + (m_0c^2 + K_+) = K_- + K_+ + 2m_0c^2 \quad (2\text{-}15)$$

En esta expresión E_- y E_+ son las energías relativistas totales y K_- y K_+ son las energías cinéticas del electrón y positrón, respectivamente. Ambas partículas tienen la misma energía de masa en reposo m_0c^2. El positrón se produce con una energía cinética ligeramente mayor a la del electrón debido a que la interacción de Coulomb del par con el núcleo cargado positivamente produce una aceleración en el positrón y una desaceleración en el electrón.

Al analizar este proceso se ignoran los detalles de la interacción misma, considerando solamente la situación antes y después de la interacción. Los principios que nos guían son la conservación de la energía relativista total, la conservación del impulso y la conservación de la carga. De estas leyes de conservación no es difícil demostrar que un fotón no puede simplemente desaparecer en el espacio vacío creando un par al momento que desaparece. La presencia de un núcleo masivo (el cual puede absorber impulso sin afectar apreciablemente el balance de energía) es necesaria para permitir que tanto la energía como el impulso se conserven en el proceso. La carga se conserva automáticamente ya que el fotón no tiene carga y el par de partículas creadas no tienen carga neta. De la ecuación 2-15 se ve que la energía mínima, o umbral, necesaria para que un fotón cree un par es $2m_0c^2$ o 1.02 MeV (1 MeV = 10^6 eV), lo cual es una longitud de onda 0.012 Å. Si la longitud de onda es menor que ésta, correspondiendo a una energía mayor que el valor umbral, el fotón crea el par con energía cinética y con energía en reposo. El fenómeno de producción de pares es un fenómeno de alta energía, los fotones pertenecen a las regiones de rayos X cortos o rayos γ en el espectro electromagnético (ver figura 2-4), región en la cual las energías son iguales o mayores que $2m_0c^2$. Como se verá en la siguiente sección, los resultados experimentales demuestran que la absorción de fotones en la interacción con la materia ocurre principalmente mediante el proceso fotoeléctrico para energías bajas, por el efecto Compton para energías medias y mediante producción de pares para energías altas.

Los pares electrón-positrón se producen en la naturaleza por fotones de los rayos cósmicos y en el laboratorio por fotones del bremsstrahlung provenientes de los aceleradores de partículas.

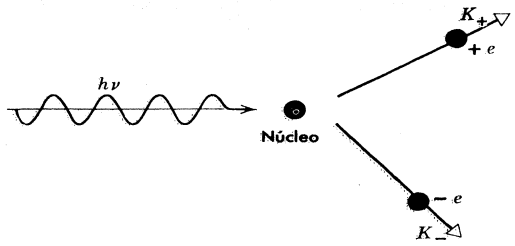


FIGURA 2-12
Proceso de producción de pares.

También se pueden producir otros pares de partículas tales como el protón y antiprotón si el fotón inicial tiene la energía suficiente. Debido a que el electrón y el positrón tienen la masa en reposo más pequeña entre las partículas conocidas, la energía umbral de su producción es la menor. Los experimentos demuestran la descripción cuántica del proceso de producción de pares, mientras que no existe explicación satisfactoria de este fenómeno en la teoría clásica.

Ejemplo 2-6. El análisis de una fotografía de una cámara de burbujas revela la creación de un par electrón-positrón cuando los fotones pasan a través de la materia. Las trazas del electrón y del positrón tienen curvaturas opuestas en el campo magnético uniforme B de 0.20 weber/m^2 y sus radios r son de 2.5×10^{-2} m. ¿Cuál era la energía y longitud de onda del fotón productor del par?

El impulso p del electrón está dado por

$$p = eBr = 1.6 \times 10^{-19} \text{ coul} \times 2.0 \times 10^{-1} \text{ weber/m}^2 \times 2.5 \times 10^{-2} \text{ m}$$
$$= 8.0 \times 10^{-22} \text{ kg-m/seg}$$

Su energía relativista total está dada por

$$E_-^2 = c^2p^2 + (m_0c^2)^2$$

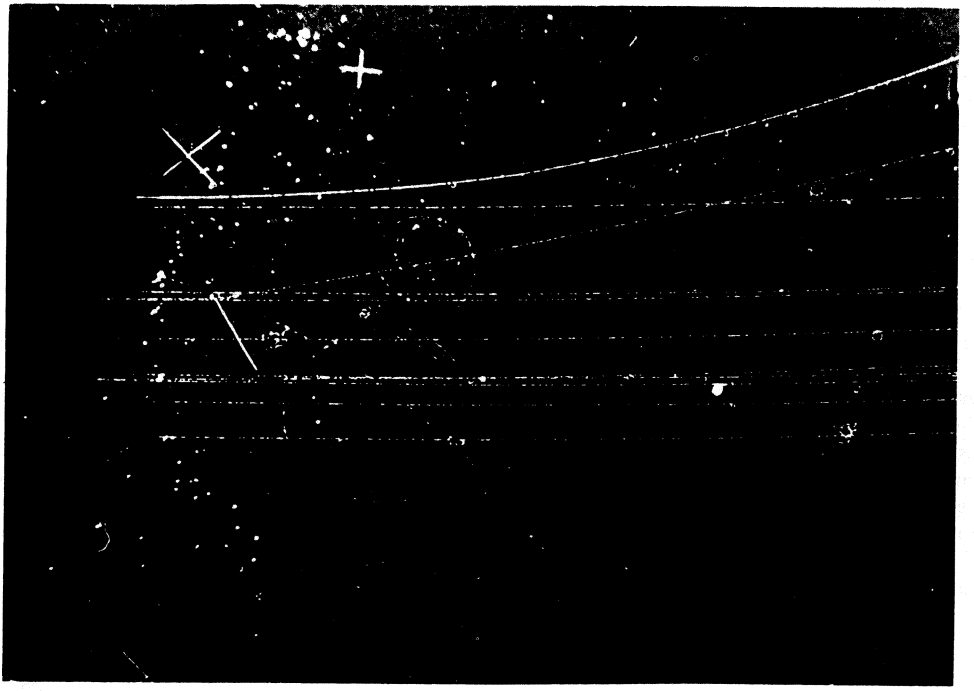


FIGURA 2-13

Producción de un par de electrones vistos en una cámara de burbujas. Las trazas del electrón y del positrón son las dos espirales que se tocan en el punto en el que tiene lugar la producción en el líquido que llena la cámara. El estudiante puede determinar cuál de las dos espirales pertenece al positrón sabiendo que las trazas largas son inicialmente deuterones cargados positivamente y que inciden desde la izquierda. (Cortesía de C. R. Sun, Universidad Estatal de Nueva York en Albany).

Puesto que $m_0c^2 = 0.51$ MeV y $pc = 8.0 \times 10^{22}$ kg-m/seg $\times\ 3.0 \times 10^8$ m/seg $= 2.4 \times 10^{-13}$ joule $= 1.5$ MeV, se tiene $E^2 = (1.5\ \text{MeV})^2 + (0.51\ \text{MeV})$ y $E = 1.6$ MeV.

La energía relativista total del positrón tenía el mismo valor puesto que su traza tenía el mismo radio, de modo que la energía del fotón era

$$h\nu = E_- + E_+ = 3.2\ \text{MeV}$$

La longitud de onda del fotón se sigue de

$$E = h\nu = hc/\lambda$$

o

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6.6 \times 10^{-34}\ \text{joule-sec} \times 3.0 \times 10^8\ \text{m/sec}}{3.2 \times 10^6\ \text{eV} \times 1.6 \times 10^{-19}\ \text{joule/eV}} = 3.9 \times 10^{-13}\ \text{m} = 0.0039\ \text{Å} \quad \blacktriangleleft$$

Intimamente relacionado con la producción de pares está el proceso inverso llamado aniquilación de pares. Un electrón y un positrón los cuales están inicialmente en reposo y cerca entre sí, se unen y se aniquilan. La materia desaparece y en su lugar se tiene energía radiante. Puesto que el impulso inicial del sistema es cero y el impulso se debe conservar en el proceso, no es posible tener un solo fotón creado ya que un solo fotón no puede tener impulso cero. El proceso más probable es la creación de dos fotones moviéndose con impulsos iguales pero en dirección opuesta. Menos probable, pero posible, es la creación de tres fotones.

En el proceso de dos fotones ilustrado por la figura 2-14, la conservación del impulso da $0 = P_1 + P_2$ ó $P_1 = -P_2$ de modo que los impulsos de los fotones son opuestos en dirección pero iguales en magnitud. Entonces $p_1 = p_2$ o $h\nu_1/c$ y $\nu_1 = \nu_2 = \nu$. Por lo tanto, la conservación de la energía relativista total requiere que $m_0c^2 + m_0c^2 = h\nu + h\nu$, el positrón y el electrón no tienen energía cinética inicial y las energías de los fotones son las mismas. En consecuencia, $h\nu = m_0c^2 = 0.51$ MeV, correspondiendo a un fotón de longitud de onda de 0.024 Å. Si el par inicial tuviera alguna energía cinética, entonces la energía del fotón excedería los 0.51 MeV y su longitud de onda debería ser menor que 0.024 Å.

En el proceso de producción de pares se crean los positrones, los cuales al pasar a través de la materia pierden energía en colisiones sucesivas hasta que se combinan con un electrón para formar un sistema ligado llamado *positronio*. El "átomo" positronio es de vida corta decayendo en fotones a los 10^{-10} segundos de su formación. Supuestamente, el electrón y el positrón se mueven alrededor de su centro de masa común en una especie de danza de la muerte antes de su aniquilación mutua.

Ejemplo 2-7. (a) Supóngase que la figura 2-14 representa el proceso de aniquilación en un sistema de referencia S en el cual el par electrón-positrón está en reposo y los dos fotones de la aniquilación moviéndose a lo largo del eje x. Encontrar la longitud de onda λ de estos fotones en términos de m_0, la masa en reposo de un electrón o positrón.

Se ha visto que p_1 es igual a p_2 y $h\nu_1$ igual a $h\nu_2$. Cada uno de los fotones tiene la misma energía, la misma frecuencia y la misma longitud de onda. Por lo tanto se pueden suprimir los subíndices, y de las relaciones $h\nu = m_0c^2$ y $p = E/c$ se obtiene

$$p = E/c = h\nu/c = m_0c^2/c = m_0c$$

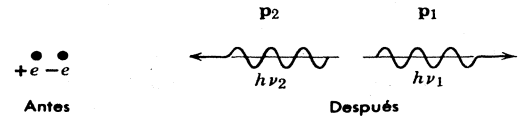


FIGURA 2-14
Aniquilación de un par que produce dos fotones.

Pero también se tiene la relación

$$p = h/\lambda$$

de modo que

$$\lambda = h/p = h/m_0c$$

Por lo tanto, en el sistema en el cual el átomo positronio está en reposo cada uno de los fotones tiene la misma longitud de onda $\lambda = h/m_0c$.

(b) Considérese ahora el mismo evento de aniquilación observado en el sistema S', que se mueve en relación a S con una velocidad v y hacia la izquierda. ¿Qué longitud de onda asignará este observador (móvil) a los fotones de aniquilación?

Aquí, inicialmente el par tiene la energía total relativista $2mc^2$, donde m es la masa relativista, en vez de tener solamente la energía con masa en reposo $2m_0c^2$, así que la conservación de la energía en el proceso de aniquilación conduce a

$$2mc^2 = p'_1c + p'_2c$$

Al mismo tiempo, ahora el par se mueve con velocidad v a lo largo de la dirección positiva del eje x' de modo que su impulso inicial es $2mv$ en vez de ser cero como antes. Ahora la conservación del impulso produce

$$2mv = p'_1 - p'_2$$

y los fotones se mueven en direcciones opuestas a lo largo del eje x'. Combinando estas dos expresiones, multiplicando la segunda por c y sumándola a la primera se obtiene,

$$p'_1 = m(c + v) = \frac{m_0(c + v)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = m_0c\sqrt{\frac{c + v}{c - v}}$$

Considerando que $p'_1 = h/\lambda'_1$, así que

$$\lambda'_1 = \frac{h}{p'_1} = \frac{h}{m_0c}\sqrt{\frac{c - v}{c + v}} = \lambda\sqrt{\frac{c - v}{c + v}} \qquad \text{(2-16a)}$$

De manera similar, restando la segunda ecuación de la primera, se obtiene

$$\lambda'_2 = \frac{h}{p'_2} = \frac{h}{m_0c}\sqrt{\frac{c + v}{c - v}} = \lambda\sqrt{\frac{c + v}{c - v}} \qquad \text{(2-16b)}$$

Los fotones *no* tienen la misma logitud de onda, pero *se corren por efecto Doppler* de una longitud de onda λ que tenían en el sistema en reposo de la fuente (el átomo positronio). Si un observador está situado en el eje x de manera que la fuente se mueve *hacia él*, recibirá el fotón 1 con una frecuencia *mayor* que la frecuencia en "reposo". Si un observador está situado en el eje x' de tal modo que la fuente se mueve *alejándose de él*, recibirá el fotón 2 con una frecuencia *menor* que la frecuencia en reposo. En realidad, este ejemplo es una derivación de la fórmula del *corrimiento Doppler longitudinal* de la teoría de la relatividad. ◀

La primera evidencia experimental del proceso de producción de pares y de la existencia de los positrones fue obtenida por Anderson en 1933 mientras investigaba la radiación cósmica. Esta radiación consiste en un flujo de fotones con gran contenido energético y partículas cargadas que inciden sobre la tierra provenientes de fuentes extraterrestres. Anderson utilizó una cámara de niebla que contenía una placa delgada de plomo, encontrándose todo el aparato en un campo magnético. Al exponer este aparato a la radiación cósmica se encontró que de una manera irregular salían desde algún punto de la placa de plomo un par de partículas cargadas. Se supuso que estos eventos eran el resultado de la interacción de un fotón con el plomo ya que no se había visto que una partícula cargada incidiera en el punto de expulsión,

mientras que un fotón por no poseer carga podría haber incidido en el punto de expulsión sin ser visto. Las dos partículas cargadas expulsadas en estos eventos eran desviadas por el campo magnético en direcciones opuestas, de tal manera que sus cargas eran de signo opuesto. De otras consideraciones se puede mostrar que las magnitudes de estas cargas son igual a una carga electrónica y que las masas de las partículas son aproximadamente igual a una masa electrónica.

El descubrimiento del proceso de la producción de pares vino a explicar el origen de una discrepancia entre la, entonces usual, teoría de la atenuación de los rayos X y las medidas de los coeficientes de atenuación para los rayos X de 2.6 MeV (rayos obtenidos de una fuente radiactiva) por diversos materiales. Como originalmente la teoría no incluía la producción de pares, la atenuación predicha era muy pequeña; con la inclusión del proceso de la producción de pares el acuerdo que se obtiene entre la teoría y el experimento es bueno. Sin embargo, la importancia real del descubrimiento de Anderson radica en la preciosa confirmación que éste vino a dar a la teoría relativista mecánico-cuántica del electrón de Dirac.

La teoría de Dirac conduce a la predicción de que los valores permitidos de la energía relativista total E para un electrón libre son

$$E = \pm\sqrt{c^2p^2 + (m_0c^2)^2} \tag{2-17}$$

donde m_0 es la masa en reposo del electrón. Estos valores son simplemente las soluciones para E de la ecuación (2-6), pero la solución con el signo menos corresponde a una energía total relativista negativa, concepto tan advenedizo para la mecánica relativista como lo es la energía total negativa para la mecánica clásica. En vez de desechar la parte negativa sobre la base de su falta de realidad física, Dirac escudriñó las consecuencias de la ecuación completa y al hacerlo llegó a algunas conclusiones muy interesantes. Considérese la figura 2-15 que es un diagrama de niveles de energía que representa la ecuación (2-17). Si existe el espectro continuo de niveles de energía que se indica, todos los electrones libres de energía positiva estarían disponibles para realizar transiciones entre estos niveles, transiciones acompañadas por la emisión de fotones con las energías apropiadas: esto obviamente no concuerda con el experimento, debido a que por lo general no se observa que electrones libres emitan espontáneamente fotones de energía $h\nu \geq 2m_0c^2$. Sin embargo, Dirac señaló que se puede superar esta dificultad si se supone que todos los niveles de energía negativa están llenos normalmente en todos los puntos del espacio. De acuerdo con esta suposición, *un vacío consiste de un mar de electrones en niveles de energía negativa.* Esto si concuerda con el experimento. Por ejemplo, la carga negativa no podría ser detectada si se la supone uniformemente distribuida y por lo tanto no ejercería fuerza sobre un cuerpo cargado. Consideraciones similares demostrarán que todas las propiedades "usuales" de un mar de electrones de energía negativa son tales que su presencia no sería aparente en ninguno de los experimentos usuales. Empero, la teoría de Dirac del vacío

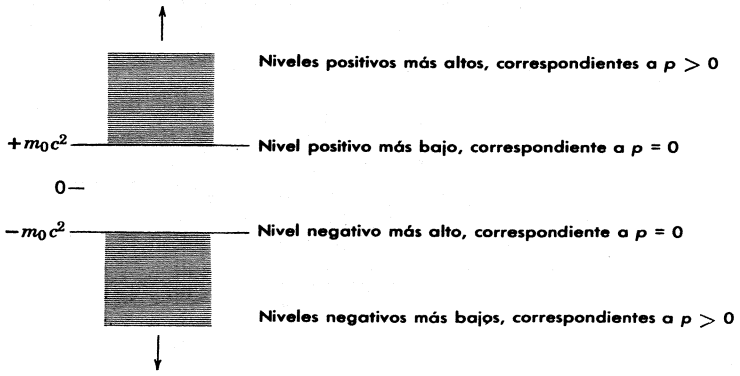


FIGURA 2-15

Niveles de energía de un electrón libre según la teoría de Dirac.

no es completamente vacía ya que predice ciertas propiedades nuevas que pueden comprobarse por el experimento.

El diagrama de niveles de energía para un electrón libre sugiere la posibilidad de excitar un electrón que se encuentra en un nivel de energía negativa mediante la absorción de un fotón. Puesto que todos los niveles de energía negativa se consideran totalmente ocupados, el electrón deberá ser excitado a uno de los niveles de energía positiva desocupados. Obviamente, la energía mínima necesaria para este proceso es $h\nu = 2m_0c^2$ y el resultado del proceso es la producción de un electrón en un nivel de energía positiva más un agujero en un nivel de energía negativa. Se puede demostrar que un agujero en un nivel de energía negativa tiene todas las propiedades mecánicas y ópticas de un positrón de energía positiva. Por ejemplo, existe una carga positiva $+e$ asociada con la ausencia de un electrón con carga negativa $-e$. Consecuentemente, este es el proceso de producción de pares observado experimentalmente por Anderson tres años después de que fuera predicho teóricamente por Dirac.

2.8 Secciones transversales para absorción y dispersión de fotones

Considérese, como en la figura 2-16 un haz paralelo de fotones que se pasan a través de una placa material. Los fotones pueden interactuar con los átomos de la placa mediante cuatro procesos diferentes: fotoeléctrico, producción de pares, Thomson y Compton. En los dos primeros los fotones se absorben completamente, mientras que en los dos últimos sólo son dispersados, pero en todos los procesos ocurre la eliminación de fotones del haz. La pregunta de qué tan probable es que estos procesos ocurran, para un conjunto de circunstancias dadas, es una de las preguntas de gran importancia tanto teóricas como prácticas. Por ejemplo, para un físico médico es muy importante diseñar el blindaje para una máquina de rayos X, o para un ingeniero nuclear diseñar el blindaje para un reactor. La respuesta a esta pregunta se expresa en términos de las cantidades llamadas secciones transversales. En este libro las secciones transversales aparecen primero en conexión con los fotones pero posteriormente aparecerán en conexión con otras cosas.

La probabilidad de que un fotón de una energía dada sea, por ejemplo, absorbido en un proceso fotoeléctrico al pasar por un átomo de la placa queda especificada por el valor de la *sección transversal* fotoeléctrica $\sigma_{I'E}$. Esta medida de la probabilidad de ocurrencia del proceso fotoeléctrico se define de modo que el número $N_{I'E}$ de absorciones fotoeléctricas que ocurren es

$$N_{I'E} = \sigma_{I'E} I n \tag{2-18}$$

cuando un haz que contiene I fotones incide sobre una placa cortada que contiene n átomos por unidad de área. Aquí se supone que la placa es lo suficientemente delgada como para que la

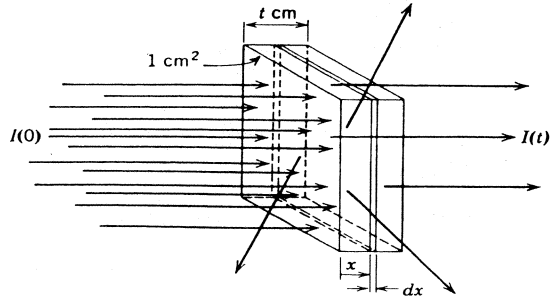


FIGURA 2-16

Haz de fotones atravezando una lámina.

probabilidad de que un fotón dado sea absorbido al pasar por la placa sea mucho menor que la unidad.

La definición de (2-18), que es un prototipo de las definiciones de todas las secciones transversales, es suficientemente importante para garantizar una interpretación física prudente. Obsérvese primero que el número N_{PE} de absorción en efecto debería incrementarse en proporción al número I de fotones que inciden sobre la placa. Además, si la placa es delgada en el sentido en el que se especificó anteriormente, los átomos en la placa no se "ensombrecerán" entre sí, por lo que toca a los fotones incidentes. Entonces, el número N_{PE} de absorciones también se incrementará en proporción al número n de átomos blanco por unidad de área de la placa; por lo que se tendrá

$$N_{PE} \propto I n$$

Si esta proporcionalidad se escribe como una igualdad en la que a la constante de proporcionalidad se la denota por σ_{PE}, se obtiene la ecuación que define la sección transversal. Por lo tanto se ve que la sección transversal cuyo valor depende tanto de la energía del fotón como del tipo de átomo, es una medida de cuán efectivos son esos átomos para absorber los fotones mediante el efecto fotoeléctrico. Puesto que las cantidades N_{PE} e I en la ecuación 2-18 son adimensionales mientras que n tiene dimensiones de (área)$^{-1}$, es claro que σ_{PE} deberá tener dimensiones de (área). Por lo tanto, resulta razonable usar el nombre de sección transversal para σ_{PE}. Casi es posible dar una interpretación geométrica si se imagina un círculo de área σ_{PE} centrado en cada átomo en la placa con la propiedad de que cualquier fotón que entre a esta placa circular es absorbido por el átomo mediante el efecto fotoeléctrico. Esta interpretación geométrica resulta conveniente para la visualización y aún para los cálculos pero definitivamente no deberá considerarse literalmente cierta. En realidad una sección transversal es simplemente una forma de expresar numéricamente la probabilidad de que cierto tipo de átomos origine un fotón de una energía dada para que realice un proceso particular. Las definiciones e interpretaciones de las secciones transversales para los otros procesos de absorción o dispersión son completamente análogas a las que se han considerado en este ejemplo.

La figura 2-17 muestra las secciones transversales de dispersión (σ_S), producción de pares (σ_{PR}), fotoeléctrica (σ_{PE}), y total (σ) medidas para un átomo de plomo como una función de la energía $h\nu$ del fotón. La sección transversal de dispersión especifica la probabilidad de que la dispersión ocurra por cualquiera de los procesos Thomson y Compton. Para el plomo que tiene un número atómico grande y por lo tanto electrones atómicos fuertemente ligados la dispersión Thomson domina sobre la dispersión Compton cuando la energía del fotón está por debajo de $h\nu = 10^5$ eV. El rompimiento brusco en la sección transversal fotoeléctrica ocurre para las energías de enlace de los diferentes electrones en el átomo de plomo; cuando $h\nu$ cae por debajo de la energía de enlace de un electrón particular ya no es posible energéticamente un proceso fotoeléctrico en el que él intervenga. La sección transversal para producción de pares crece muy rápidamente desde cero cuando $h\nu$ excede la energía umbral $2m_0c^2 \simeq 10^6$ eV necesaria para materializar el par. En la figura 2-17 la sección transversal total σ es la suma de las secciones transversales de dispersión, fotoeléctrica y de producción de pares; esta cantidad especifica la probabilidad de que un fotón tenga cualquier tipo de interacción con el átomo. De la figura se pueden ver los intervalos de valores de la energía en los cuales cada uno de los tres procesos hace su contribución más importante, para el caso del plomo:

Efecto fotoeléctrico:	$h\nu < 5 \times 10^5$ eV
Dispersión:	5×10^5 eV $< h\nu < 5 \times 10^6$ eV
Producción de pares:	5×10^6 eV $< h\nu$

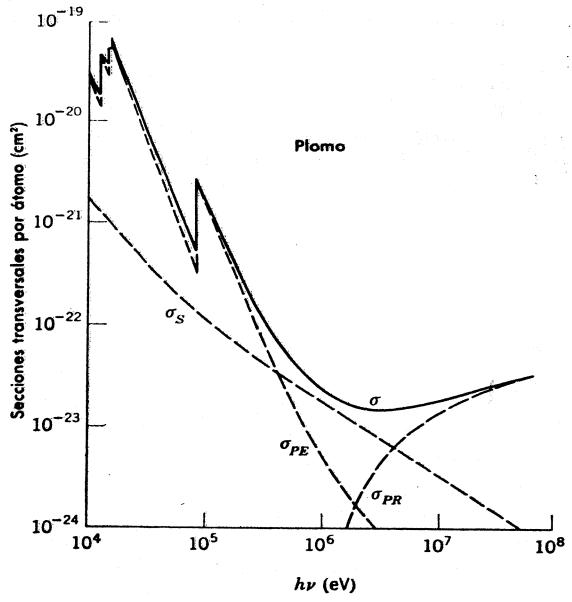


FIGURA 2-17

Secciones transversales de dispersión, fotoeléctrica, de producción de pares y total para un átomo de plomo.

Debido a que estos procesos tienen probabilidades diferentes dependiendo del número atómico, los intervalos de energía en los cuales ellos dominan son muy distintos para átomos con número atómico bajo. Para el aluminio, los intervalos de energía son aproximadamente:

Efecto fotoeléctrico:	$h\nu < 5 \times 10^4$ eV
Dispersión.	5×10^4 eV $< h\nu < 1 \times 10^7$ eV
Producción de pares:	1×10^7 eV $< h\nu$

Ejemplo 2-8. Evaluar la atenuación de un haz de rayos X paralelos al pasar a través de una placa *gruesa* de materia en términos de la sección transvesal total.

Con referencia a la figura 2-16, cuando el haz incide sobre la cara frontal de la placa de espesor t el número de fotones en el haz es $I(0)$ y la sección cortada contiene ρ átomos por cm³. Supóngase, por simplicidad, que el área de la sección cortada es de 1 cm². Debido a los procesos de dispersión y absorción, el haz paralelo contiene un número pequeño $I(x)$ de fotones después de haber penetrado en la sección cortada x cm. Considérese una lámina delgada de la placa de espesor dx y localizada en x. El número de átomos por cm² en la lámina es ρ veces su volumen dx o ρdx. En una definición análoga a (2-18), el número de fotones del haz que serán dispersados o absorbidos en la lámina está especificado por la sección transversal total σ y es $\sigma I(x)\rho\, dx$. De esta manera, el número de fotones del haz que salen de la lámina, $I(x + dx)$, que es igual al número incidente menos el número que se ha perdido, es

$$I(x + dx) = I(x) - \sigma I(x)\rho\, dx$$

o

$$dI(x) \equiv I(x + dx) - I(x) = -\sigma I(x)\rho\, dx$$

Para encontrar el número $I(t)$ de fotones que salen por la cara posterior de la placa se despeja $dI(x)/I(x)$ y se integra sobre x

$$\begin{aligned}
\frac{dI(x)}{I(x)} &= -\sigma\rho\, dx \\
\int_0^t \frac{dI(x)}{I(x)} &= -\sigma\rho \int_0^t dx \\
\ln I(x)]_0^t &= -\sigma\rho\, t \\
\ln \frac{I(t)}{I(0)} &= -\sigma\rho\, t \\
\frac{I(t)}{I(0)} &= e^{-\sigma\rho t} \\
I(t) &= I(0)e^{-\sigma\rho t}
\end{aligned} \tag{2-19}$$

La intensidad del haz, medida por el número I de fotones que contiene, decrece exponencialmente conforme el espesor t de la placa aumenta. La cantidad $\sigma\rho$, llamada *coeficiente de atenuación*, tiene dimensiones de (cm^{-1}) y es el recíproco del espesor de la placa necesario para atenuar la intensidad del haz por un factor e. A este espesor se le llama la *longitud de atenuación* Λ y es

$$\Lambda = 1/\sigma\rho \tag{2-20}$$

Por supuesto, el coeficiente de atenuación tiene la misma dependencia con la energía del fotón que la sección transversal total. La figura 2-18 muestra medidas de los coeficientes de atenuación para el plomo, el estaño y el aluminio para fotones de energía relativamente alta.

Esta sección resume muchos de los aspectos prácticos de los fenómenos de emisión y absorción de radiación electromagnética que se han estudiado en este capítulo. Pero los aspectos fundamentales de estos fenómenos se resumen mejor afirmando que demuestran que la radiación electromagnética está cuantizada en partículas energéticas llamadas fotones. También deberá darse énfasis al hecho de que los fenómenos de interferencia y difracción demuestran que los fotones no viajan desde un sistema en el que son emitidos hasta donde son absorbidos en la forma simple en la que lo hacen las partículas clásicas: sino que los fotones actúan como si fueran guiados por ondas clásicas debido a que al viajar a través de un sistema, tal como un aparato de difracción, quedan mejor descritos por ondas clásicas que se propagan en dicho aparato.

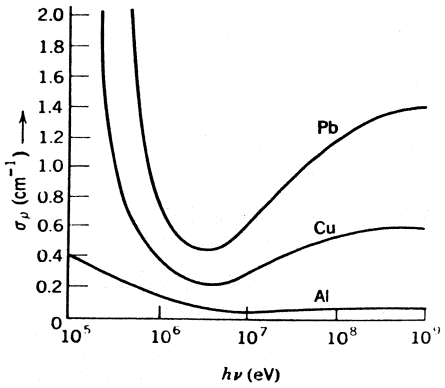


FIGURA 2-18

Coeficientes de atenuación para distintos átomos para un intervalo de energía del fotón.

PREGUNTAS

1. En los experimentos de efecto fotoeléctrico, la corriente (número de electrones emitidos por unidad de tiempo) es proporcional a la intensidad de la luz. ¿Se puede usar solamente este resultado para distinguir entre las teorías clásica y cuántica?

2. ¿Por qué en la figura 2-2 la corriente fotoeléctrica no aumenta verticalmente hacia su máximo valor (saturación) cuando la diferencia de potencial aplicada es ligeramente más positiva que $-V_0$?

3. ¿Por qué, aun cuando la radiación incidente es monocromática los fotoelectrones son emitidos con una gama de velocidades?

4. A la existencia de una frecuencia de corte en el efecto fotoeléctrico se le considera con frecuencia como la objeción más fuerte a la teoría ondulatoria. Explique.

5. ¿Por qué las mediciones en el efecto fotoeléctrico son muy sensibles a la superficie fotoeléctrica?

6. ¿Los resultados de los experimentos fotoeléctricos invalidan el experimento de interferencia de Young?

7. ¿Se puede utilizar el artificio de hacer $h \rightarrow 0$ para obtener los resultados clásicos a partir de los cuánticos en el caso del efecto fotoeléctrico? Explique.

8. Suponga que la emisión de fotones desde una fuente de radiación es caótica en dirección. ¿Podría esperar que la intensidad (o la densidad de energía) variara inversamente al cuadrado de la distancia de la fuente en la teoría de los fotones como ocurre en la teoría ondulatoria?

9. ¿Tiene masa un fotón de energía E? Si es así, evalúela.

10. ¿Por qué en la dispersión de Compton podría Ud. esperar que $\Delta\lambda$ fuera independiente de los materiales que componen al dispersor?

11. ¿Cuándo esperaría Ud. observar más fácilmente el efecto Compton con blancos dispersores compuestos por átomos con número atómico grande o con átomos con número atómico bajo? Explique.

12. ¿Se observa el efecto Compton con luz visible? ¿Por qué?

13. De la teoría electromagnética clásica, ¿esperaría un mínimo definido en la longitud de onda de la radiación emitida cuando el valor de la energía de un electrón incidente sobre un blanco de un tubo de rayos X está dado?

14. Un tubo de televisión, ¿emite rayos X? Explique.

15. ¿Qué efecto(s) produce, sobre el espectro de rayos X resultante, el decremento del voltaje del tubo?

16. Analizar el proceso de bremsstrahlung como el inverso del proceso Compton y como el inverso del proceso fotoeléctrico.

17. Describir varios métodos que se pueden utilizar para determinar experimentalmente el valor de la constante de Planck (h).

18. ¿De qué factores esperaría Ud. juzgar si un fotón pierde su energía en la interacción con la materia por proceso fotoeléctrico, por proceso Compton o por proceso de producción de pares?

19. ¿Puede Ud. dar evidencia experimental que contradiga la idea de que el vacío es un mar de electrones en estados de energía negativa?

20. ¿Puede ocurrir una aniquilación electrón-positrón con la creación de *un* fotón, si existe un núcleo cercano disponible para compensar el impulso?

21. Explique cómo es posible la aniquilación de pares con la creación de *tres* fotones. En principio, ¿es posible crear más de tres fotones en un sólo proceso de aniquilación?

22. ¿Cuál sería el proceso inverso al de la creación de dos fotones en una aniquilación electrón-positrón? ¿Puede ocurrir esto? ¿Es fácil que ocurra?

23. ¿Qué hay de malo en tomar la interpretación geométrica de sección transversal literalmente?

PROBLEMAS

1. (a) La energía necesaria para extraer un electrón del sodio es 2.3 eV. ¿El sodio presentará efecto fotoeléctrico para luz amarilla con $\lambda = 5890$ Å? ¿Cuál es la longitud de onda de corte para emisión fotoeléctrica de sodio?

2. Sobre una superficie de aluminio incide luz de longitud de onda 2000 Å. Se requieren 4.2 eV para extraer un electrón del aluminio. ¿Cuál será la energía cinética del (a) más rápido y (b) más lento de los fotoelectrones emitidos? (c) ¿Cuál será el potencial de frenamiento? (d) ¿Cuál es la longitud de onda de corte para el aluminio? (e) Si la intensidad de la luz incidente es 2.0 W/m^2, ¿cuál es el número promedio de fotones por unidad de tiempo por unidad de área que inciden sobre la superficie?

3. La función trabajo para una superficie de litio limpia es 2.3 eV. Haga una gráfica esquemática del potencial de frenamiento V_0 contra la frecuencia de la luz incidente para esta superficie, indicando los puntos importantes.

4. El potencial de frenamiento para fotoelectrones emitidos desde una superficie iluminada con luz de longitud de onda $\lambda = 4910$ Å es 0.71 V. cuando se cambia la longitud de onda incidente, se encuentra que el potencial de frenamiento es 1.43 V. ¿Cuál es la nueva longitud de onda?

5. En un experimento fotoeléctrico en el cual se utilizan luz monocromática y un fotocátodo de sodio, se encuentra un potencial de frenamiento de 1.85 V para $\lambda = 3000$ Å y 0.82 V para $\lambda = 4000$ Å. A partir de estos datos determine (a) Un valor para la constante de Planck, (b) la función trabajo en electrón-volts para el sodio y (c) la longitud de onda umbral para el sodio.

6. Considere luz incidiendo sobre una placa fotográfica. La luz será registrada si disocia una molécula de AgBr en la placa. La energía mínima para disociar esta molécula es del orden de 10^{-19} joules. Evaluar la máxima longitud de onda de corte para la cual la luz no sería registrada.

7. Si se quieren evitar errores mayores que el 1% cuando en el efecto fotoeléctrico intervienen electrones con $v/c > 0.1$, se deberá usar la expresión relativista para la energía cinética. Para fotoelectrones extraídos de una superficie de aluminio ($w_0 = 4.2$ eV) ¿Cuál es la longitud de onda menor de un fotón incidente para el cual se puede utilizar la expresión clásica?

8. Rayos X con $\lambda = 0.71$ Å extraen fotoelectrones de una hoja de oro. Los electrones describen trayectorias circulares de radio r en una región de inducción magnética B. Los experimentos muestran que $rB = 1.88 \times 10^{-4}$ Tesla-m. Encontrar (a) la energía cinética máxima de los fotoelectrones y (b) el trabajo hecho en remover un electrón de la hoja de oro.

9. (a) Demostrar que un electrón libre no puede absorber un fotón y conservar en el proceso tanto la energía como el impulso. En consecuencia, el proceso fotoeléctrico requiere un electrón ligado. (b) Sin embargo, en el efecto Compton el electrón *puede* ser libre. Explique.

10. Bajo condiciones normales el ojo humano registrará una sensación visual a 5500 Å si cuando menos se absorben 100 fotones por segundo. ¿Cuál es el nivel de potencia equivalente?

11. La radiación solar cae sobre la tierra a razón de 1.94 cal/cm^2-min sobre una superficie normal a los rayos incidentes. ¿Cuál es el equivalente en fotones por cm^2-min, si se supone una longitud de onda promedio de 5500 Å ?

12. ¿Cuáles son la frecuencia, longitud de onda e impulso de un fotón cuya energía es igual a la energía de masa en reposo de un electrón?

13. Dentro de la descripción de la radiación en términos de fotones, demostrar que si haces de radiación de dos longitudes de onda diferentes tienen la misma intensidad (o densidad de energía), entonces los números de fotones por unidad de área transversal por segundo en los haces están en la misma relación que las longitudes de onda.

14. Derivar la relación

$$\cot\frac{\theta}{2} = \left(1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}\right)\tan\varphi$$

entre la dirección de movimiento del fotón dispersado y el electrón de retroceso en el efecto Compton.

15. Derivar una relación entre la energía cinética K del electrón de retroceso y la energía E del fotón incidente en el efecto Compton. Una forma de la relación es

$$\frac{K}{E} = \frac{\left(\frac{2h\nu}{m_0c^2}\right)\operatorname{sen}^2\frac{\theta}{2}}{1 + \left(\frac{2h\nu}{m_0c^2}\right)\operatorname{sen}^2\frac{\theta}{2}}$$

(Sugerencia: véase ejemplo 2-4.)

16. Sobre electrones libres inciden fotones de longitud de onda 0.024 Å. (a) Encontrar la longitud de onda de un fotón que es dispersado a 30° de la dirección incidente y la energía cinética suministrada al electrón de retroceso. (b) Repetir el cálculo si el ángulo de dispersión es 120°. (Sugerencia: véase ejemplo 2-4).

17. Un fotón de rayos X de energía inicial 1.0×10^5 eV que viaja en la dirección positiva del eje x, incide sobre un electrón libre y en reposo. El fotón es dispersado a ángulo recto en la dirección positiva del eje y. Encontrar las componentes del impulso del electrón de retroceso.

18. (a) Demostrar que el cambio fraccional en la energía del fotón en el efecto Compton $\Delta E/E$, es igual a $(h\nu'/m_0c^2)(1 - \cos\theta)$. (b) Graficar $\Delta E/E$ contra θ e interpretar físicamente la curva.

19. ¿Cuál es la energía cinética máxima posible de un electrón de retroceso de Compton en términos de la energía $h\nu$ del fotón incidente y de la energía en reposo del electrón m_0c^2?

20. Determinar el corrimiento máximo en longitud de onda en la dispersión Compton de fotones por *protones*.

21. (a) Demostrar que la longitud de onda de corte en la parte baja del espectro continuo de rayos X está dada por $\lambda_{\min} = 12.4\ \text{Å}/V$, donde V es el voltaje aplicado en kilovolts. (b) ¿Cuál es la $\lambda_{\min}$? si el voltaje a través de un tubo de rayos X es 186 KV?

22. (a) ¿Cuál es el voltaje mínimo a través de un tubo de rayos X que producirá un rayo X con la longitud de onda de Compton? ¿Una longitud de onda de 1 Å? (b) ¿Cuál es el voltaje mínimo necesario a través de un tubo de rayos X si la radiación bremsstrahlung resultante es capaz de producir pares?

23. Un rayo γ crea un par electrón-positrón. Demostrar directamente que, sin la presencia de un tercer cuerpo que tome algo del impulso, no es posible la conservación simultánea del impulso y la energía. (Sugerencia: haga iguales las energías y demuestre que esto conduce a impulsos distintos antes y después de la interacción).

24. Un rayo γ puede producir un par electrón-positrón tanto en vecindades de un electrón en reposo como en las de un núcleo. Demostrar que en este caso la energía umbral es $4m_0c^2$. (Sugerencia: no desprecie el retroceso del electrón original y suponga que las tres partículas se mueven juntas. También use el sistema de referencia del centro de masas).

25. Un par de partículas se produce de modo que el positrón está en reposo y el electrón tiene una energía cinética de 1.0 MeV moviéndose en la dirección de vuelo del fotón productor. (a) Despreciando la energía transferida al núcleo del átomo cercano, encontrar la energía del fotón incidente. (b) ¿Qué porcentaje del impulso del fotón se transfiere al núcleo?

26. Suponga que un par electrón-positrón se forma mediante un fotón que tiene la energía umbral para el proceso. (a) Calcular el impulso transferido al núcleo en el proceso. (b) Suponga que el núcleo es de un átomo de plomo y calcule la energía cinética del núcleo de retroceso. ¿Está justificado el despreciar esta energía en comparación con la energía umbral supuesta anteriormente?

27. Demostrar que los resultados del ejemplo 2-8, expresados en términos de ρ y t son válidos independientemente del área supuesta para la sección cortada.

28. Demostrar que la longitud de atenuación Λ es justamente igual a la distancia promedio que un fotón viaja antes de ser dispersado o absorbido.

29. Use los datos de la figura 2-17 para calcular el espesor de una lámina de plomo que atenúe por un factor 100 un haz de rayos X de 10 KeV.

3

Postulado de de Broglie Propiedades ondulatorias de las partículas

3.1 Ondas de materia 81

Postulado de de Broglie; longitud de onda de de Broglie; experimento de Davisson y Germer; experimento de Thompson; difracción de átomos de helio y neutrones.

3.2 Dualidad onda-partícula 88

Principio de complementaridad; interpretación de Einstein de la dualidad para la radiación; interpretación de Born de la dualidad para la materia; funciones de onda; principio de superposición.

3.3 El principio de incertidumbre 91

Enunciado del principio; interpretación; explicación de su orígen físico según Bohr.

3.4 Propiedades de las ondas de materia 95

Velocidades de la onda y de grupo; igualdad de la velocidad de la partícula y la velocidad de grupo; dispersión de frecuencias y longitudes de onda recíprocas en un grupo de ondas; derivación del principio de incertidumbre a partir del postulado de de Broglie; amplitud de un estado cuántico.

3.5 Algunas consecuencias del principio de incertidumbre 105

Relación con la complementaridad; limitaciones impuestas a la mecánica cuántica.

3.6 Filosofía de la teoría cuántica **106**

Interpretación de Copenhague de Bohr y Heisenbergh; puntos de vista de Einstein y de de Broglie.

Preguntas **108**

Problemas **109**

3

Postulado de de Broglie Propiedades ondulatorias de las partículas

3.1 Ondas de materia

Maurice de Broglie era un físico francés quien, desde un principio, apoyó el punto de vista de Compton sobre la naturaleza corpuscular de la radiación. Sus experimentos y estudios sobre los problemas filosóficos de la física de ese tiempo, impresionaron tanto a su hermano Louis, que éste cambió su carrera de historia a física. En 1924, Louis de Broglie propuso la existencia de ondas de materia en la tesis doctoral que presentó a la Facultad de Ciencias de la Universidad de París. Lo original y concienzudo de su tesis fue reconocido inmediatamente, sin embargo, sus ideas fueron consideradas como carentes de realidad física por su aparente falta de evidencias experimentales. Fue Albert Einstein quien reconoció su importancia y validez y atrajo hacia ella la atención de otros físicos. Cinco años después, de Broglie obtuvo el premio Nobel en física, cuando sus ideas fueron experimentalmente confirmadas en forma dramática.

La hipótesis de de Broglie consistía en que el comportamiento dual de la radiación, es decir, onda-partícula, debería ser igualmente aplicable a la materia. Así como el fotón tiene asociado una onda de luz que gobierna su movimiento, una partícula de materia (por ejemplo, un electrón) tiene asociada una onda de materia que gobierna su movimiento. Ahora bien, como el universo consiste en general, de radiación y materia, la sugerencia de de Broglie es esencialmente una afirmación acerca de una gran simetría de la naturaleza. En efecto, propuso que los aspectos ondulatorios de la materia están relacionados con los aspectos corpusculares en la misma forma cuantitativa que en el caso de la radiación. De acuerdo con de Broglie, tanto para la materia como para la radiación, la energía total E de un ente se relaciona con la frecuencia ν de la onda asociada a su movimiento por medio de la ecuación

$$E = h\nu \tag{3-1a}$$

y el impulso p del ente se relaciona con la longitud de onda λ de la onda asociada por la ecuación

$$p = h/\lambda \tag{3-1b}$$

En lo anterior, los conceptos corpusculares energía E, e impulso P, se relacionan con los conceptos ondulatorios frecuencia ν y longitud de onda λ a través de la constante de Planck h. A la ecuación (3-1b) escrita en la forma siguiente se le denomina *relación de de Broglie.*

$$\lambda = h/p \tag{3-2}$$

que predice la *longitud de onda de de Broglie* de una *onda de materia* asociada con el movimiento de una partícula material de impulso p.

Ejemplo 3-1. (a) ¿Cuál será la longitud de onda de de Broglie de una pelota de béis-bol que se mueve a una velocidad $v = 10\text{m/seg}$?

Suponga $m = 1.0$ kg. De (3-2)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg}}{1.0\,\text{kg} \times 10\,\text{m/seg}} = 6.6 \times 10^{-35}\,\text{m} = 6.6 \times 10^{-25}\,\text{Å}$$

(b) ¿Cuál será la longitud de onda de un electrón cuya energía cinética es 100 eV?

En este caso;

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg}}{(2 \times 9.1 \times 10^{-31}\,\text{kg} \times 100\,\text{eV} \times 1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule/eV})^{1/2}}$$

$$= \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg}}{5.4 \times 10^{-24}\,\text{kg-m/seg}} = 1.2 \times 10^{-10}\,\text{m} = 1.2\,\text{Å}$$ ◀

En los experimentos de óptica geométrica, no se manifiesta la naturaleza ondulatoria de la propagación de la luz, ya que, las dimensiones importantes de los aparatos utilizados son muy grandes comparadas con la longitud de onda de la luz. Si se representa por a una dimensión característica de un aparato óptico (es decir, la amplitud de una lente; espejo o rendija) y λ es la longitud de onda de la luz que pasa por el aparato, se está en el dominio de la óptica geométrica siempre que $\lambda/a \to 0$. La razón es que los efectos de difracción en cualquier aparato siempre ocurren para ángulos de aproximadamente $\theta = \lambda/a$, de modo que los efectos de difracción son completamente despreciables cuando $\lambda/a \to 0$. Obsérvese que la óptica geométrica implica la propagación de rayos, que son similares a las trayectorias del movimiento de partículas clásicas.

Sin embargo, cuando la dimensión característica de un aparato óptico a se vuelve comparable con, o menor que, la longitud de onda λ de la luz que pasa por él, se está en el dominio de la óptica física. En este caso $\lambda/a \geqslant 1$, y el ángulo de difracción $\theta = \lambda/a$ es suficientemente grande como para que los efectos de difracción sean fácilmente observables y la naturaleza ondulatoria de luz resulta aparente. Por lo tanto, para observar características ondulatorias, en el movimiento de materia, se requieren sistemas con aperturas u obstáculos adecuadamente pequeños. Los sistemas de aperturas, en la escala más fina, de que disponían los experimentadores contemporáneos de de Broglie, los constituirían los espacios entre planos de átomos adyacentes en un sólido, donde $a \simeq 1$ Å. (En la actualidad se dispone de sistemas que involucran dimensiones nucleares de $\simeq 10^{-4}$ Å). Considerando los resultados del ejemplo 3-1, se ve que no se puede esperar poder detectar *ningún* comportamiento ondulatorio en el movimiento de una pelota de béis-bol, donde $\lambda/a \simeq 10^{-25}$ para $a \simeq 1$ Å. Sin embargo, para una partícula material con una masa mucho menor que la de una pelota de béis-bol, el impulso p se reduce y la longitud de onda de de Broglie $\lambda = h/p$ crece lo suficiente como para que puedan observarse efectos de difracción. Utilizando aparatos con dimensiones características $a = 1$ Å, los aspectos ondulatorios en el movimiento del electrón con $\lambda = 1.2$ Å del ejemplo 3-1, resultarían evidentes.

En 1926, Elsasser propuso que la naturaleza ondulatoria de la materia podía ser probada del mismo modo como inicialmente se probó la naturaleza ondulatoria de los rayos X, a saber, haciendo incidir un haz de electrones, con la energía apropiada, sobre un sólido cristalino. Los átomos del cristal son utilizados como un arreglo tridimensional de centros dispersores para la onda electrónica y, por lo tanto, deberán dispersar fuertemente a los electrones en ciertas direcciones características, de igual forma que en la difracción de rayos X. Esta idea fue confirmada experimentalmente por Davisson y Germer en Estados Unidos y por Thomson en Escocia.

El aparato de Davisson y Germer se muestra esquemáticamente en la figura 3-1. Los electrones producidos por un filamento caliente son acelerados a través de una diferencia de potencial V y emergen del "cañón electrónico" G con una energía cinética eV. Este haz de

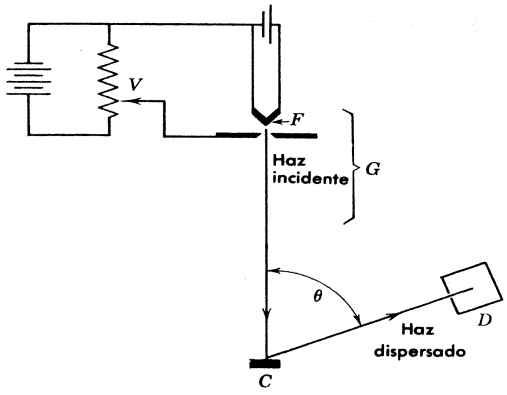


FIGURA 3-1

Aparato de Davisson y Germer. Los electrones de un filamento F son acelerados por una diferencia de potencial variable V. Después de dispersarse en el cristal C, son colectados por el detector D.

electrones incide perpendicularmente sobre un monocristal de nickel en C. El detector D se coloca a un ángulo θ determinado y se realizan medidas de la intensidad del haz dispersado para varios valores del potencial de aceleración V. Por ejemplo, en la figura 3-2, se muestra que un haz fuertemente dispersado es detectado a $\theta = 50°$ para $V = 54V$. La existencia de este "pico" en el patrón de electrones dispersados demuestra cualitativamente la validez del postulado de de Broglie, ya que, *sólo puede explicarse como una interferencia constructiva de ondas dispersadas por el arreglo periódico de los átomos hacia los planos del cristal.* El fenómeno es análogo a las bien conocidas "reflexiones de Bragg" que ocurren en la dispersión de rayos X por los planos atómicos de un cristal y no puede entenderse en base al movimiento de una partícula clásica sino sólo en base al movimiento de ondas. Las partículas clásicas no pueden mostrar interferencia, mientras que las ondas si lo hacen. La interferencia que aquí se implica, no ocurre entre las ondas asociadas con un electrón y las ondas asociadas con otro, sino que se refiere a la interferencia que ocurre entre diferentes partes de la onda asociada con un electrón y que han sido dispersadas por varias regiones del cristal. Esto se puede demostrar, si se utiliza un haz de electrones con una intensidad tan baja que los electrones pasan por un aparato uno por uno y mostrando que el patrón de electrones dispersados permanece invariante.

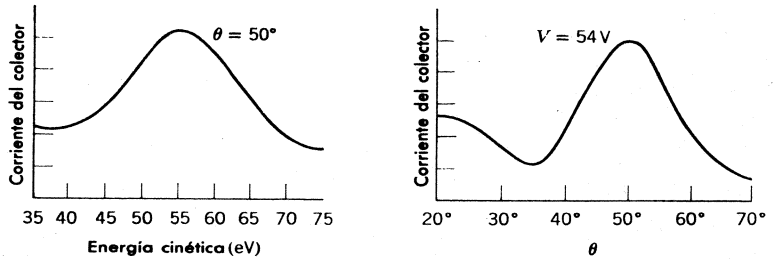


FIGURA 3-2

Izquierda: la corriente del colector en el detector D de la figura 3-1, como función de la energía cinética de los electrones incidentes, mostrando un máximo de difracción. El ángulo θ en la figura 3-1, se ajusta a 50°. Si se utiliza un valor apreciablemente mayor o menor, el máximo de difracción desaparece. *Derecha:* la corriente como función del ángulo del detector para un valor fijo de la energía cinética electrónica, 54 eV.

El origen de una reflexión de Bragg, se muestra en la figura 3-3 y la *relación de Bragg*, a que está sujeta, se deriva en el pie de figura.

$$n\lambda = 2\,d\,\text{sen}\,\varphi \tag{3-3}$$

Para las condiciones mostradas en la figura 3-3, la distancia interplanar efectiva d se puede medir por dispersión de rayos X del mismo cristal y resulta ser 0.91 Å. Como $\theta = 50°$ entonces $\varphi = 90° - 50°/2 = 65°$. La longitud de onda calculada de (3-3), suponiendo $n = 1$, resulta

$$\lambda = 2\,d\,\text{sen}\,\varphi = 2 \times 0.91\ \text{Å} \times \text{sen}\,65° = 1.65\ \text{Å}$$

Para electrones de 54 eV, la longitud de onda de de Broglie calculada de (3-2), es

$$\lambda = h/p = 6.6 \times 10^{-34}\ \text{joule-seg}/4.0 \times 10^{-24}\ \text{kg-m/seg} = 1.65\ \text{Å}$$

Esta impresionante concordancia proporciona una confirmación cuantitativa de la relación de de Broglie entre λ, p y h.

La amplitud del pico observado en la figura 3-2, también se puede entender fácilmente, ya que, los electrones de baja energía no pueden penetrar profundamente en el cristal, de modo que sólo un número pequeño de planos atómicos contribuyen a la onda difractada. Por lo tanto, el máximo correspondiente a la difracción no es *estrecho*. Sin lugar a dudas, todos los resultados experimentales estuvieron en excelente concordancia tanto cualitativa como cuantitativa-

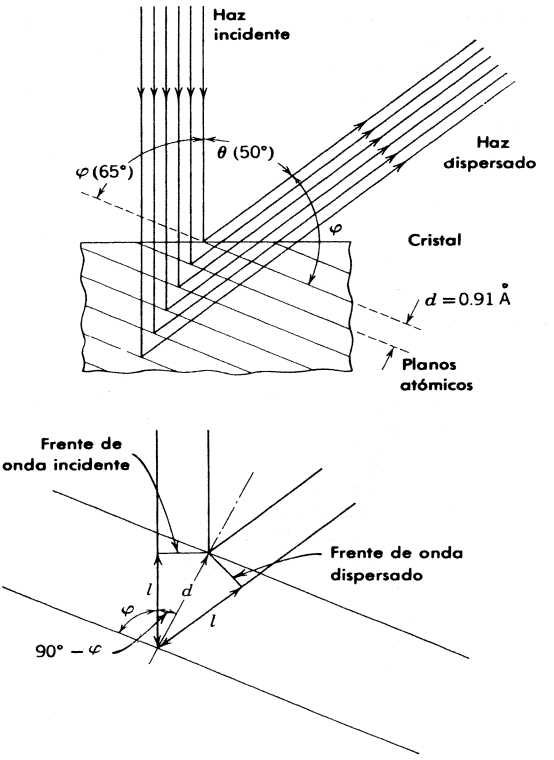


FIGURA 3-3

Arriba: el haz fuertemente difractado a $\theta = 50°$ y $V = 54$V resulta de la dispersión de tipo ondulatorio por la familia de planos atómicos que se muestran, los cuales tienen una distancia de separación $d = 0.91$ Å. El ángulo de Bragg es $\varphi = 65°$. La refracción del haz dispersado al atravezar la superficie del cristal, no se indica por simplicidad. *Abajo:* derivación de la relación de Bragg, mostrando sólo dos planos atómicos y dos rayos correspondientes a los haces incidente y difractado. Si el número de longitudes de onda que caben en la distancia $2l$ entre los frentes de onda incidente y dispersado, es un entero dado por $n\lambda$, medida sobre el rayo inferior, entonces, las contribuciones de ambos rayos al frente de onda dispersado, estarán en fase y se obtendrá un máximo de difracción en el ángulo φ. Como $l/d = \cos(90° - \varphi) = \text{sen}\,\varphi$, se tiene $2l = 2d\,\text{sen}\,\varphi$ y por lo tanto se obtiene la relación de Bragg $n\lambda = 2d\,\text{sen}\,\varphi$. El máximo de difracción de "primer orden", $(n = 1)$, por lo general el más intenso.

mente con la predicción de de Broglie, aportando evidencias convincentes de que las partículas materiales se mueven de acuerdo con las leyes del movimiento de ondas.

En 1927, G.P. Thomson demostró la difracción de haces electrónicos que pasan a través de películas delgadas, confirmando independientemente y en detalle, la relación de de Broglie $\lambda = h/p$. Así como el experimento de Davisson-Germer es análogo al de Laue en difracción de rayos X (reflexión del arreglo regular de planos atómicos en un monocristal grande), el experimento de Thomson es análogo al método de Debye-Hull-Scherrer de difracción de rayos X por un polvo (transmisión a través de un agregado de cristales pequeños orientados aleatoriamente. Thomson utilizó electrones de mayor energía, que son mucho más penetrantes, de modo que son varios cientos de planos atómicos los que contribuyen a la onda difractada. El patrón de difracción resultante tiene una estructura muy precisa. A manera de comparación, en la figura 3-4 se muestra un patrón de difracción de rayos X y un patrón de difracción de electrones de substancia policristalina (substancia en la que se tiene un gran número de cristales microscópicos orientados aleatoriamente).

Resulta interesante hacer notar que J.J. Thomson en 1897 descubrió el electrón (caracterizándolo como una partícula con una relación carga-masa bien definida) y quien recibió el premio Nobel en 1906; fue el

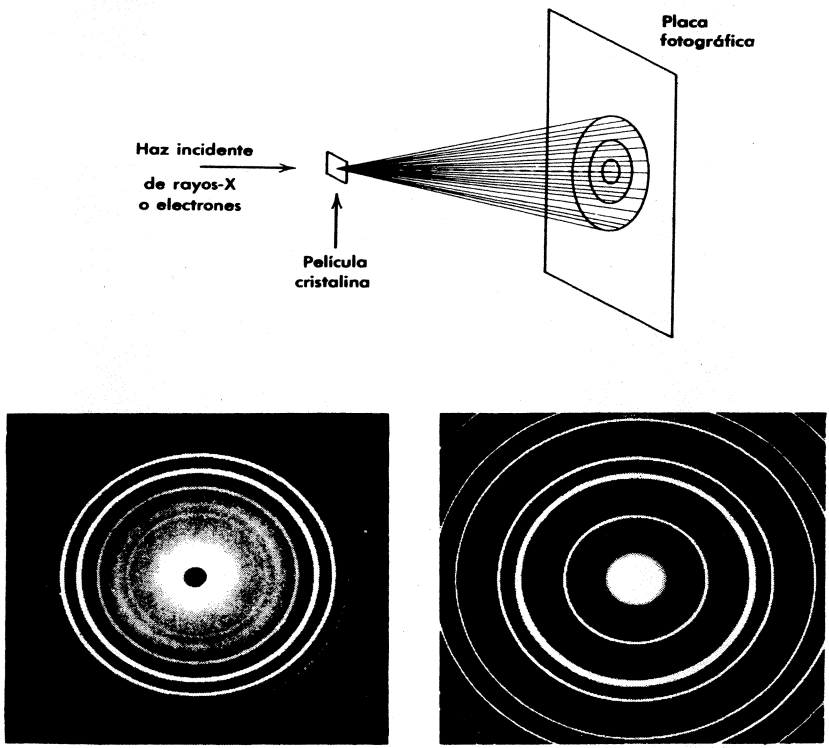


FIGURA 3-4

Arriba: arreglo experimental para la difracción de Debye-Scherrer de rayos X o electrones por un material policristalino. *Abajo a la izquierda:* patrón Debye-Scherrer de difracción de rayos X por cristales de óxido de Zirconio. *Abajo a la derecha:* patrón Debye-Scherrer de difracción de electrones por cristales de oro.

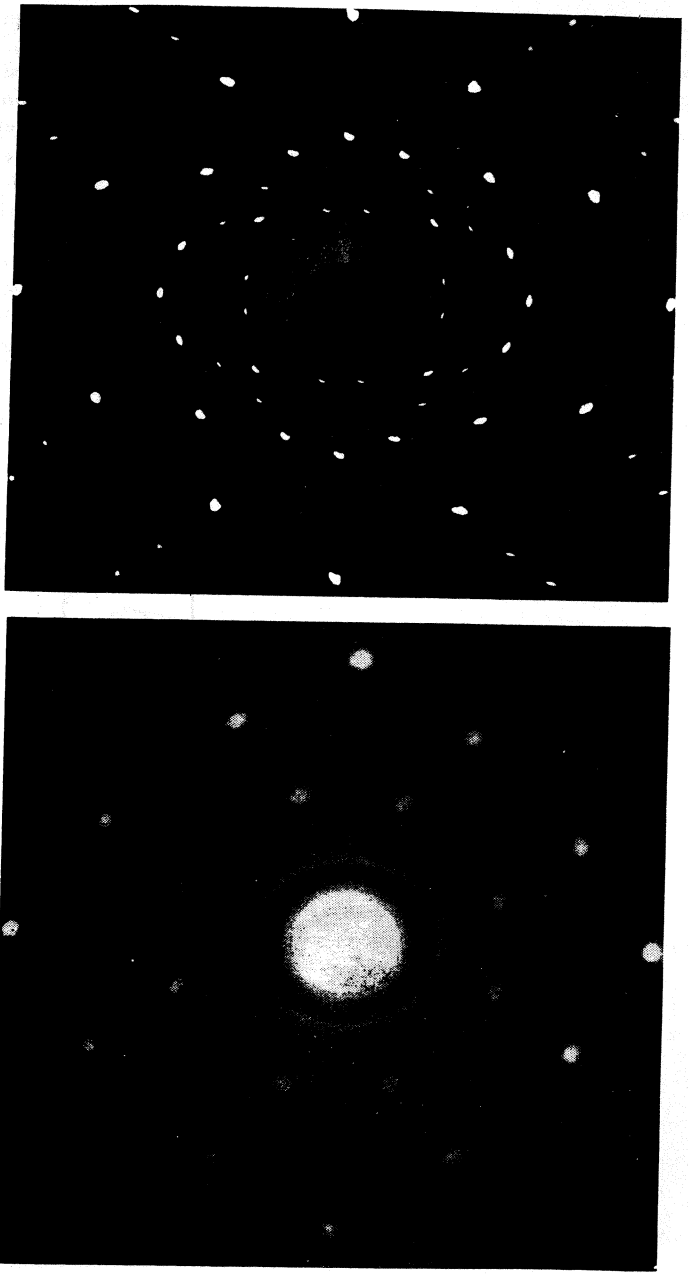


FIGURA 3-5

Arriba: patrón de Laue de la difracción de rayos X por un monocristal de cloruro de sodio. *Abajo:* patrón de Laue de difracción de neutrones de un reactor nuclear por un monocristal de cloruro de sodio.

padre de G.P. Thomson, quien en 1927 descubrió experimentalmente la difracción de electrones y recibió el premio Nobel (con Davisson) en 1937. Acerca de lo anterior escribió Max Jammer: "Uno se inclinaría por decir que a Thomson, el padre, le fue otorgado el premio Nobel por haber demostrado que el electrón es una partícula y a Thomson, el hijo, por haber demostrado que el electrón es una onda".

Todos los objetos materiales, cargados o descargados, no solo los electrones, muestran características ondulatorias en su movimiento, bajo las condiciones de la óptica física. Por ejemplo, Estermann, Stern y Frisch, realizaron experimentos cuantitativos acerca de la difracción de haces moleculares de hidrógeno y haces atómicos de helio, por un cristal de fluoruro de litio; asimismo, Fermi, Marshall y Zinn demostraron la difracción e interferencia de neutrones lentos. En la figura 3-5 se muestra un patrón de difracción de neutrones en un cristal de cloruro de sodio. Inclusive se ha construido un interferómetro que opera con haces de electrones. La existencia de ondas de materia está bien establecida.

Resulta instructivo hacer notar que para poder encontrar evidencias experimentales de la naturaleza ondulatoria de la materia, se tuvo que recurrir a longitudes de onda de de Broglie relativamente grandes. La materia y la radiación, ambas presentan, propiedades de partícula y onda, tanto para longitudes de onda grandes como pequeñas. Los aspectos corpusculares se acentúan, cuando se estudia su emisión o absorción, mientras que los aspectos ondulatorios se acentúan, cuando se estudia su comportamiento al moverse a través de un sistema. Sin embargo, los aspectos ondulatorios de su movimiento son más difíciles de observar a medida que su longitud de onda es más pequeña. Una vez más se puede apreciar el papel tan importante que juega la constante de Planck h. Si h fuera cero, en $\lambda = h/p$ se obtendría $\lambda = 0$ en todos los casos. Por lo tanto, todas las partículas materiales tendrían una longitud de onda menor que cualquier dimensión característica y nunca sería posible observar efectos de difracción. Aunque el valor de h definitivamente no es cero, es pequeño. Esta pequeñez de h es lo que obscurece la existencia de ondas materiales en el mundo macroscópico, ya que, se deberán tener impulsos muy pequeños para poder obtener longitudes de onda mensurables. Para partículas macroscópicas ordinarias, su masa es tan grande que el impulso es siempre lo suficientemente grande como para que la longitud de onda de de Broglie sea suficientemente pequeña y se encuentre fuera del alcance de la detección experimental, y así la mecánica clásica reina suprema. En el mundo microscópico, las partículas materiales tienen masas tan pequeñas que sus impulsos son pequeños aun cuando sus velocidades son bastante altas. Por lo tanto, sus longitudes de onda de de Broglie son lo suficientemente grandes como para ser comparables con las dimensiones características de los sistemas de interés, tales como átomos, y sus propiedades ondulatorias son experimentalmente observables en su movimiento. Sin embargo, no debe olvidarse que en sus interacciones, por ejemplo cuando son detectadas, sus propiedades corpusculares son dominantes aún cuando sus longitudes de onda sean grandes.

Ejemplo 3-2. En los experimentos con átomos de helio a los que anteriormente se hizo referencia, se produce un haz de átomos con velocidad casi uniforme de 1.635×10^5 cm/seg, permitiendo el escape de helio en forma de gas, a través de un pequeño agujero en el recipiente que lo contiene, pasando a una cámara evacuada y luego a través de rendijas muy angostas sobre discos giratorios paralelos de corta separación (un selector mecánico de velocidades). Los átomos inciden sobre la superficie de un cristal de fluoruro de litio y se observa un haz de átomos de helio fuertemente difractado que emerge del cristal. El haz difractado se detectó con un medidor de presión de alta sensibilidad. El análisis usual de los resultados experimentales de la difracción en el cristal indican una longitud de onda de 0.600×10^{-8} cm. ¿Cómo es la concordancia de ésto con el valor calculado de la longitud de onda de de Broglie?

La masa de un átomo de helio es:

$$m = \frac{M}{N_0} = \frac{4.00 \text{ g/mol}}{6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol}} = 6.65 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

De acuerdo con la ecuación de de Broglie, la longitud de onda es:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{6.65 \times 10^{-27} \text{ kg} \times 1.635 \times 10^{3} \text{ m/seg}} = 0.609 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$= 0.609 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

Este resultado es 1.5% mayor que el valor medido por difracción en un cristal, pero está dentro de los límites de error del experimento. ◀

Experimentos como el considerado en el ejemplo 3-2 son muy difíciles de realizar, ya que las intensidades que se obtienen en haces atómicos son muy pequeñas. Los experimentos de difracción de neutrones, utilizando cristales con distancia interatómica conocida, proporcionan una confirmación precisa de la ecuación de de Broglie y de la existencia de ondas de materia. La precisión se debe a que la fuente de neutrones en reactores nucleares es muy abundante y, efectivamente, la difracción de neutrones es hoy día un método importante para el estudio de estructuras cristalinas. Ciertos cristales, como los orgánicos hidrogenados, son particularmente adecuados para análisis con difracción de neutrones, ya que los neutrones son fuertemente dispersados por los átomos de hidrógeno, mientras que los rayos x son dispersados muy débilmente por dichos átomos. Principalmente, los rayos X interactúan con los electrones en el átomo y los electrones interactúan con la carga nuclear así como con los electrones atómicos por fuerzas electromagnéticas, de modo que su interacción con átomos de hidrógeno es débil, ya que su carga es pequeña. Los neutrones, sin embargo, interactúan con el núcleo de los átomos por medio de fuerzas nucleares y la interacción es fuerte.

3.2 La dualidad onda-partícula

En la física clásica, la energía es transportada por partículas o por ondas. El físico clásico observaba las ondas de agua transportando energía sobre la superficie del agua o balas transportando energía del cañón al blanco. De tales experiencias, construyeron un modelo ondulatorio de ciertos fenómenos macroscópicos y un modelo corpuscular para otros fenómenos macroscópicos, extrapolando naturalmente estos modelos a regiones menos accesibles al ojo humano. Así por ejemplo, se explicó la propagación del sonido en base al modelo ondulatorio y la presión de los gases en base al modelo corpuscular (teoría cinética). El éxito obtenido los condicionó a esperar que todo ente debiera ser o partícula u onda. De hecho, estos éxitos llegaron a los primeros años del siglo veinte, con las aplicaciones de la teoría ondulatoria de Maxwell a la radiación y el descubrimiento de partículas elementales de materia, tales como el neutrón y el positrón.

Así pues, el físico clásico no estaba preparado para descubrir que para poder entender la radiación, en algunas situaciones era necesario invocar un modelo corpuscular, como en el efecto Compton, mientras que en otras situaciones, un modelo ondulatorio, como en la difracción de rayos X. Pero quizás, sea más sorprendente el hecho de que esta dualidad onda-partícula se aplique, tanto a la materia, como a la radiación. La relación carga-masa del electrón y su rastro de ionización en la materia (secuencia de colisiones localizadas) sugieren un modelo corpuscular, sin embargo, la difracción de electrones sugiere un modelo corpuscular. El físico actual sabe que, a un ente dado, debe aplicarle ambos modelos. Sin embargo, es importante hacer notar que, en una medición dada, se debe aplicar un solo modelo, ya que no se puede utilizar ambos modelos bajo las mismas circunstancias. Cuando una partícula es detectada, mediante algún tipo de interacción, actúa como partícula, en el sentido de que está localizada; cuando está en movimiento, actúa como onda, en el sentido de que se observan fenómenos de interferencia y, desde luego, una onda se extiende y no está localizada.

Neils Bohr resumió esta situación en su *principio de complementaridad.* Los modelos corpuscular y ondulatorio son complementarios; si una medida prueba el carácter ondulatorio de la radiación o la materia, entonces es imposible probar la naturaleza corpuscular en el mismo

experimento y viceversa. El modelo que se utilice lo determina la naturaleza del experimento. Además, el conocimiento de la radiación o la materia será incompleto, a menos que se consideren medidas que revelen tanto los aspectos ondulatorios como los corpusculares. Así pues, la radiación y la materia no son ni simplemente ondas ni simplemente partículas. Para describir este comportamiento, se requiere un modelo más general, y desde el punto de vista clásico, más complicado, a pesar de que en casos extremos sea aplicable un modelo ondulatorio simple o un modelo corpuscular simple.

La conexión entre los modelos corpuscular y ondulatorio, se encuentra en una interpretación probabilística de la dualidad onda-partícula. En el caso de la radiación, fue Einstein quien unificó las teorías ondulatoria y corpuscular; subsecuentemente Max Born aplicó un argumento similar para unificar las teorías ondulatoria y corpuscular de la materia.

Desde el punto de vista ondulatorio, la intensidad de radiación, I, es proporcional a $\overline{\mathscr{E}^2}$, donde $\overline{\mathscr{E}^2}$ es el promedio sobre un ciclo del cuadrado de la intensidad de campo eléctrico de la onda. (I es el valor promedio del llamado vector de Poynting y se utiliza el símbolo $\mathscr{E}$ en lugar de E, para el campo eléctrico, para evitar se confunda con la energía total E). Desde el punto de vista de los fotones o corpuscular, la intensidad de la radiación se escribe como $I = Nh\nu$, donde N es el número promedio de fotones que cruzan una unidad de área, perpendicular a la dirección de propagación, por unidad de tiempo. Fue Einstein quien sugirió que $\overline{\mathscr{E}^2}$, que en la teoría electromagnética es proporcional a la energía radiante en una unidad de volumen, podría interpretarse como una medida del número promedio de fotones por unidad de volumen.

Recuérdese que Einstein introdujo la idea de granularidad en la radiación, abandonando la interpretación continua de Maxwell. Esto conduce a una interpretación estadística de la intensidad. Desde este punto de vista, una fuente puntual emite fotones al azar en todas direcciones. El número promedio de fotones que crucen una unidad de área, decrecerá a medida que aumente la distancia entre la fuente y el área. Esto se debe a que los fotones se dispersan sobre una esfera cuya área es mayor a medida que están más alejados de la fuente. Como el área de una esfera es proporcional al cuadrado de su radio, en promedio, se obtiene una ley inversamente proporcional al cuadrado para la intensidad, de igual modo que en el caso ondulatorio. Desde el punto de vista ondulatorio, puede imaginarse que, desde una fuente, se generan ondas esféricas cuya intensidad disminuye en forma inversamente proporcional a la distancia de la fuente. En este caso, estas ondas se pueden considerar como ondas guía para los fotones, cuya intensidad puede medirse por $\overline{\mathscr{E}^2}$, las ondas por sí mismas, no poseen energía —solo son fotones— pero son una construcción artificial cuya intensidad mide el número promedio de fotones por unidad de volumen.

Se ha utilizado la palabra "promedio", porque los procesos de emisión son de naturaleza estadística. No se especifica cuántos fotones cruzan una unidad de área por unidad de tiempo, solo su número promedio; su número exacto puede fluctuar en el espacio y en el tiempo, del mismo modo como en la teoría cinética de los gases existen fluctuaciones de muchas cantidades respecto a un valor promedio. Sin embargo, se puede afirmar categóricamente, que la probabilidad de que un fotón cruce una unidad de área a 3 m de la fuente, es exactamente un noveno de la probabilidad de que un fotón cruce una unidad de área a 1 m de la fuente. Por lo tanto, en la fórmula $I = Nh\nu$, N es un valor promedio que es una medida de la probabilidad de encontrar a un fotón cruzando una unidad de área en una unidad de tiempo. Si se igualan las expresiones ondulatoria y corpuscular, se tiene;

$$I = (1/\mu_0 c)\overline{\mathscr{E}^2} = h\nu N$$

de modo que $\overline{\mathscr{E}^2}$ es proporcional a N. Entonces, la interpretación de Einstein de $\overline{\mathscr{E}^2}$, como medida probabilística de la densidad de fotones, se va aclarando. Se espera que, como en la teoría cinética, las fluctuaciones respecto a un promedio sean más notorias a bajas intensidades que a altas intensidades, de modo que, en ese caso, los fenómenos granulares cuánticos contradicen más dramáticamente el punto de vista del espectro continuo clásico.

En analogía al punto de vista de Einstein de la radiación, Max Born propuso una unión similar de la dualidad onda-partícula de la materia. Esto sucedió varios años después de que Schrödinger desarrolló su generalización del postulado de de Broglie, llamada mecánica cuántica. La teoría de Schrödinger será examinada cuantitativamente en capítulos posteriores. Aquí sólo se tratará de usar la idea de Born, en forma cualitativa para conceptualmente preparar el escenario para un análisis detallado subsecuente.

Se asociará a las ondas de materia algo más que una longitud de onda y una frecuencia. Esto se hará introduciendo una función que represente a la onda de de Broglie, llamada *función de onda*. Por ejemplo, para partículas moviéndose en la dirección x con un valor preciso de su impulso lineal y su energía, la función de onda se puede escribir simplemente como una función senoidal de amplitud A, tal como:

$$\Psi(x,t) = A \operatorname{sen} 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) \tag{3-4a}$$

Esto es análogo a

$$\mathscr{E}(x,t) = A \operatorname{sen} 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) \tag{3-4b}$$

para el campo eléctrico de una onda electromagnética senoidal con longitud de onda λ, y frecuencia ν, moviéndose en la dirección x. La cantidad $\overline{\Psi^2}$ para ondas de materia, se comportará de manera análoga al de $\overline{\mathscr{E}^2}$ para ondas de radiación. Esa cantidad, el promedio del cuadrado de la función de onda de ondas de materia, es una medida de la probabilidad de encontrar a una partícula por unidad de volumen, en determinado lugar a un tiempo dado. Así como $\mathscr{E}$ es una función del tiempo y del espacio, también lo es Ψ, y como se verá después, así como $\mathscr{E}$ satisface una ecuación de onda, así también Ψ (la ecuación de Schrödinger). La cantidad $\mathscr{E}$ es una onda (de radiación) asociada con un fotón, mientras que Ψ es una onda (de materia) asociada con una partícula.

Como dice Born: "De acuerdo con este punto de vista, el curso completo de eventos está gobernado por las leyes de la probabilidad, a un estado en el espacio, le corresponde una probabilidad definitiva, la cual es dada por la onda de de Broglie asociada con el estado. Por lo tanto, un proceso mecánico es acompañado por un proceso ondulatorio, la onda-guía, descrita por la ecuación de Schrödinger, cuya importancia está en dar la probabilidad de un cuerso definitivo del proceso mecánico. Si por ejemplo, la amplitud de la onda-guía es cero en cierto punto del espacio, esto quiere decir que la probabilidad de encontrar al electrón en ese punto es despreciablemente pequeña".

Así como desde el punto de vista de Einstein de la radiación, no se especifica la posición exacta de un fotón, sino que en su lugar se especifica $\overline{\mathscr{E}^2}$, la probabilidad de encontrar un fotón en cierta posición a un tiempo dado; así también, desde el punto de vista de Born, no se especifica la posición exacta de una partícula a un tiempo determinado, sino que se especifica $\overline{\Psi^2}$, la probabilidad de encontrar a la partícula en cierta posición a un tiempo dado. Además, así como se acostumbra a sumar funciones de onda $(\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2 = \mathscr{E})$ para dos ondas electromagnéticas superpuestas, cuya intensidad resultante se obtiene de $\mathscr{E}^2$, así también se podían sumar las funciones de onda de dos ondas de materia superpuestas $(\Psi_1 + \Psi_2 = \Psi)$ cuya intensidad resultante será dada por $\overline{\Psi^2}$. Es decir, un *principio de superposición* es aplicable tanto a ondas de materia como a radiación. Esto concuerda con el sorprendente hecho experimental, de que la materia presenta propiedades de interferencia y difracción, hecho que simplemente no puede explicarse en base a las ideas de la mecánica clásica. Dos ondas siempre se pueden combinar de modo tal que resulte una onda de intensidad grande o que se cancelen, ya que pueden superponerse constructivamente (en fase) o destructivamente (fuera de fase), pero dos partículas clásicas no se pueden combinar de modo tal que se cancelen.

Posiblemente, el estudiante aceptará lo lógico de la fusión de los conceptos de onda y de partícula y, sin embargo, se preguntará si una interpretación probabilística o estadística es necesaria. En 1927, Heisenberg y Bohr fueron los primeros en demostrar que en la unión de las descripciones ondulatoria y corpuscular de la materia y la radiación, es esencial el concepto de probabilidad. Estos temas serán investigados en las siguientes secciones.

3.3 El principio de incertidumbre

El uso de consideraciones probabilísticas, no es ajeno a la física clásica. Por ejemplo, la mecánica estadística clásica utiliza la teoría de la probabilidad. Sin embargo, las leyes básicas de la física clásica (tales como las leyes de Newton) son deterministas, y el análisis estadístico es simplemente un instrumento que se utiliza en el tratamiento de sistemas muy complicados. Por otro lado, de acuerdo con Heisenberg y Bohr, el punto de vista probabilístico es fundamental en la física cuántica y el determinismo debe ser descartado. A continuación se verá cómo se llega a esta conclusión.

En mecánica clásica, pueden resolverse las ecuaciones de movimiento de un sistema con fuerzas dadas, para obtener la posición y el impulso de una partícula para todo valor del tiempo. Todo lo que se necesita conocer es la posición e impulso de la partícula para algún valor del tiempo, $t = 0$ (las condiciones iniciales), y el movimiento futuro será determinado exactamente. Esta mecánica ha sido utilizada con gran éxito en el mundo macroscópico, en astronomía por ejemplo, para predecir los movimientos subsecuentes de objetos en base a sus movimientos iniciales. Sin embargo, nótese, que en el proceso de hacer observaciones, el observador interactúa con el sistema. Un ejemplo de la astronomía moderna, es la medición precisa de la posición de la luna, haciendo rebotar ondas de radar en ella. El movimiento de la luna es **perturbado por la medición, pero su masa es tan grande que la perturbación se puede ignorar. En** una escala más pequeña, como un experimento macroscópico bien diseñado sobre la tierra, dichas perturbaciones son también generalmente muy pequeñas o al menos, controlables y se pueden tomar en cuenta de antemano por cálculos adecuados. Por lo tanto, el físico clásico suponía, de modo natural, que en el campo de los sistemas microscópicos, la posición y el impulso de un objeto, como un electrón, podrían determinarse exactamente por medio de observaciones similares. Heisenberg y Bohr pusieron en tela de juicio esta suposición.

La situación es muy similar a la que existía al nacimiento de la teoría de la relatividad. Los físicos hablaban de intervalos de tiempo y longitud, es decir, espacio y tiempo, sin preguntarse críticamente cómo son medidos en realidad. Por ejemplo, se hablaba de la simultaneidad de dos eventos separados, sin siquiera preguntarse cómo se podría establecer dicha simultaneidad. Einstein demostró que la simultaneidad no era un concepto absoluto, como se había supuesto antes, sino que dos eventos que son simultáneos para un observador, ocurren a tiempos diferentes para otro observador que se mueve respecto al primero. La simultaneidad es un concepto relativo. Así pues, de modo similar, debe preguntarse cómo se mide realmente la posición y el impulso.

En un experimento real, ¿se puede determinar la posición y el impulso de la materia o la radiación, en el mismo instante? La respuesta que se obtiene de la teoría cuántica, es: no más exactamente que lo permitido por el *principio de incertidumbre* de Heisenberg. Existen dos partes de este principio, también llamado principio de indeterminación. La primera parte implica la medición simultánea de la posición y el impulso. Afirma que en un experimento no se puede determinar simultáneamente el valor exacto de una componente del impulso, es decir, p_x de una partícula y también el valor exacto de la coordenada correspondiente x. Por otro lado, la precisión en la medición estará inherentemente limitada por el proceso de medida en sí, de modo tal que

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2 \tag{3-5}$$

donde el impulso p_x se conoce hasta una incertidumbre de Δp_x y al mismo tiempo, la posición x hasta una incertidumbre de Δx. Aquí, $\hbar$ (Léase h-barra) es una notación simplificada en lugar de $h/2\pi$, donde h es la constante de Planck. Es decir;

$$\hbar \equiv h/2\pi$$

Existen las relaciones correspondientes para las otras componentes del impulso, a saber, $\Delta p_y \Delta y \geq \hbar/2$ y $\Delta p_z \Delta z \geq \hbar/2$, y asimismo para el impulso angular. Es importante hacer notar que este principio nada tiene que ver con los adelantos en la instrumentación que conduzcan a mejores determinaciones simultáneas de p_x y x. Lo que el principio afirma es que aún con instrumentos ideales, nunca se puede superar $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$. Obsérvese también que se implica un *producto* de incertidumbres, de modo que, por ejemplo, entre más se modifique un experimento para mejorar p_x, más se sacrifica la habilidad de poder determinar x con precisión. Si p_x se conociera exactamente, se ignoraría totalmente la x (es decir, si $\Delta p_x = 0$, $\Delta x = \infty$). Por lo tanto, la *restricción no está en la precisión con la que se pueda medir x o* p_x, *sino en el producto* $\Delta p_x \Delta x$ en una medida simultánea de ambas.

La segunda parte del principio de incertidumbre está relacionada con medidas de la energía E, y el tiempo t necesarios para medir, por ejemplo, el intervalo Δt durante el cual un fotón es emitido de un átomo con una variación en su energía ΔE. En este caso

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2 \tag{3-6}$$

donde ΔE es la incertidumbre en el conocimiento de la energía E del sistema y Δt el intervalo característico de la rapidez de cambio del sistema.

Más adelante se demostrará que las relaciones de Heisenberg se pueden derivar del postulado de de Broglie y de propiedades sencillas comunes a toda onda. Dado que el postulado de de Broglie se puede verificar por los experimentos descritos anteriormente, se puede afirmar que el principio de incertidumbre se basa en el experimento. Asimismo, pronto se verá que este principio es consistente con otros experimentos. Sin embargo, primero se debe hacer notar que, una vez más, la constante de Planck sirve para distinguir los resultados cuánticos de los clásicos. Si h, o $\hbar$, fuera cero en (3-5) y (3-6), no habría ninguna limitación básica en las medidas, como es el caso en el punto de vista clásico. Una vez más, la pequeñez de h, es lo que pone al principio fuera de las experiencias ordinarias. Lo anterior es análogo a la pequeñez de la relación v/c en situaciones macroscópicas, que pone a la relatividad fuera de alcance en experiencias ordinarias. Por lo tanto, en principio, la física clásica tiene una validez limitada y, en el dominio microscópico, conducirá a contradicciones con los resultados experimentales, ya que si x y p no pueden determinarse simultáneamente, entonces las condiciones iniciales del movimiento no se pueden especificar exactamente y consecuentemente no se podrá determinar con precisión el comportamiento futuro de un sistema. En lugar de hacer predicciones deterministas sólo se pueden enunciar los resultados más probables de una observación, dando las probabilidades relativas de que ocurran. En efecto, como el hecho de observar un sistema lo perturba de modo no completamente predecible, la observación cambia el movimiento anterior del sistema a un estado de movimiento nuevo que no puede ser conocido completamente.

En lo siguiente se mostrará el origen físico del principio de incertidumbre, y en este proceso se obtendrá una visión más clara que ayudará a apreciar mejor una demostración más formal que se da en la sección subsecuente. Primeramente, se utiliza un experimento de pizarrón debido a Bohr, para verificar (3-5). Se propone medir, tan exactamente como sea posible, la posición de una partícula "puntual", como un electrón. Para mayor precisión, se utiliza un microscopio para observar al electrón, como el que se ilustra en la figura 3-6. Para poder ver al electrón, es necesario iluminarlo, ya que lo que ve el observador, son los fotones de la luz dispersados por el electrón. En este punto, aún sin hacer cálculo alguno, se puede ver cómo

aparece el principio de incertidumbre. El propio acto de observar al electrón lo perturba. En el momento de iluminar al electrón, éste retrocede a consecuencia del efecto Compton, de modo tal que, como se verá, no se puede determinar completamente. Sin embargo, si el electrón no está iluminado, no puede ser observado (detectado). Por lo tanto, el principio de incertidumbre se refiere al proceso mismo de medición y expresa el hecho de que siempre existe una interacción indeterminada entre el observador y lo observado; no existe nada que pueda hacerse para evitar esta interacción o para compensarla por adelantado. En el caso que se está considerando, se puede tratar de reducir la perturbación al electrón lo más posible, utilizando una fuente de luz débil. La fuente más débil que se puede obtener será tal que se observará al electrón sólo si *un solo fotón* dispersado entra en la lente objetivo. La magnitud del impulso del

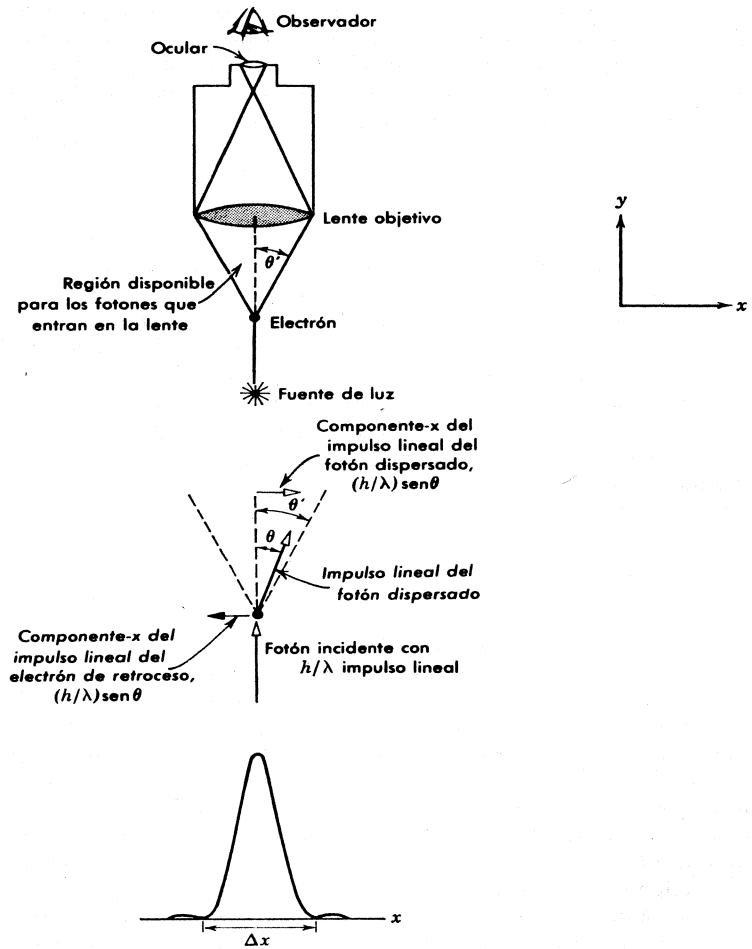


FIGURA 3-6

Microscopio del experimento de pizarrón de Bohr. *Arriba:* el aparato. *Centro:* dispersión de un fotón de iluminación por un electrón. *Abajo:* imagen del patrón de difracción del electrón, visto por el observador.

fotón es $p = h/\lambda$. Pero el fotón puede ser dispersado en *cualquier dirección* dentro del ángulo $2\theta'$ que subtiende la lente objetivo en el electrón. Por esta razón, no es posible considerar la interacción. Por lo tanto, se encuentra que la componente x del impulso del fotón puede variar desde $+p$ sen θ' hasta $-p$ sen θ' y su incertidumbre después de la interacción está dada por:

$$\Delta p_x = 2p \operatorname{sen} \theta' = (2h/\lambda) \operatorname{sen} \theta'$$

Por la conservación del impulso, se requiere que el electrón reciba impulso de retroceso en la dirección x que será igual en magnitud al cambio en la magnitud de la componente x del impulso del fotón y, por lo tanto, la componente x del impulso del electrón, tendrá una incertidumbre dada por la misma cantidad. Obsérvese que para reducir Δp_x, se puede utilizar luz de mayor longitud de onda o utilizar un microscopio cuya lente objetivo subtienda un ángulo menor.

¿Qué hay de la posición del electrón a lo largo de x? Recuérdese que la imagen de un punto, en un microscopio, no es un punto, sino un patrón de difracción; la imagen del electrón es "borrosa". El poder de resolución del microscopio determina la exactitud última a la cual se puede localizar el electrón. Si como medida de la incertidumbre en x se toma la amplitud del máximo de difracción central, una expresión bien conocida para el poder de resolución de un microscopio da:

$$\Delta x = \lambda / \operatorname{sen} \theta'$$

(nótese que como sen $\theta \simeq \theta$, este es un ejemplo de la relación general, $a \simeq \lambda/\theta$ entre la dimensión característica de un aparato de difracción, la longitud de onda de las ondas difractadas y el ángulo de difracción). Entonces, el único fotón disponible debió originarse en *algún* lugar dentro de esta región del eje del microscopio, de manera tal que la incertidumbre en la posición es Δx. (No se puede asegurar exactamente en dónde se origina un fotón dado, a pesar de que un número grande de repeticiones del experimento, los fotones que forman la imagen total, producirán el patrón de difracción que se muestra en la figura). Obsérvese que para reducir Δx se puede analizar luz de longitud de onda más corta o una lente objetivo que subtienda un ángulo mayor.

Tomando el **producto** de las incertidumbres, se encuentra

$$\Delta p_x \, \Delta x = \left(\frac{2h}{\lambda} \operatorname{sen} \theta'\right)\left(\frac{\lambda}{\operatorname{sen} \theta'}\right) = 2h \tag{3-7}$$

en concordancia razonable con el límite último $\hbar/2$ que fija el principio de incertidumbre. No es posible hacer Δp_x y Δx *simultáneamente*, tan pequeñas como se quiera, ya que el procedimiento que reduce una de ellas incrementa la otra. Por ejemplo, si se utiliza luz de longitud de onda corta (por ejemplo rayos γ) para reducir Δx obteniendo una mejor resolución, se aumenta el retroceso de Compton y aumenta Δp_x, e inversamente. De hecho, la longitud de onda, λ y el ángulo θ' subtendido por la lente objetivo, ni siquiera aparecen en el resultado. En la práctica, los resultados experimentales serán peores que lo que se sugiere en (3-7), ya que dicho resultado representa el caso más ideal posible. Sin embargo, se llega a ese resultado a partir de fenómenos físicos genuinamente mensurables, a saber, el efecto Compton y el poder de resolución de una lente.

En realidad, el estudiante no debe pensar que hay algo de misterioso en este resultado. Es un resultado directo de la cuantización de la radiación. Fue necesario tener al menos un fotón iluminando al electrón, o de otra forma no habría iluminación; y aún un solo fotón lleva un impulso de magnitud $p = h/\lambda$. Es este único fotón el que provee la interacción entre el microscopio y el electrón. Esta interacción perturba la partícula de modo tal, que no se puede predecir ni controlar y el resultado es que ni las coordenadas ni el impulso pueden conocerse completamente después de una medición. Si las leyes de la física clásica fuesen válidas, entonces

la radiación sería considerada como continua en lugar de granular y la iluminación se podría reducir a niveles arbitrariamente pequeños al mismo tiempo que se utilizarían longitudes de onda arbitrarias para obtener una resolución "perfecta". En principio no habría un límite inferior simultáneamente para la resolución y el impulso de retroceso y no habría principio de incertidumbre. Pero esto no se puede hacer, un fotón es indivisible. Una vez más se puede ver de $\Delta p_x \Delta x \geq h/2$, que la constante de Planck es una medida de la mínima perturbación incontrolable que distingue a la física cuántica de la física clásica.

Ahora se considerará (3-6) que relaciona la incertidumbre en la energía y en el tiempo. Para el caso de una partícula libre, (3-6) puede obtenerse de (3-5), que relaciona la posición y el impulso en la forma siguiente. Considérese un electrón que se mueve a lo largo del eje x y cuya energía se puede escribir como $E = p_x^2/2m$. Si la incertidumbre en p_x está dada por Δp_x, entonces la incertidumbre en E estará dada por $\Delta E = (p_x/m)\Delta p_x = v_x \Delta p_x$. En este caso v_x puede interpretarse como la velocidad de retroceso a lo largo de x, del electrón que es iluminado para medir su posición o si el tiempo requerido para una medida es Δt, entonces, la incertidumbre en su posición x es $\Delta x = v_x \Delta t$. Combinando $\Delta t = \Delta x/v_x$ y $\Delta E = v_x \Delta p_x$, se obtiene $\Delta E \Delta t = \Delta p_x \Delta x$. Pero $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$. Por lo tanto:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$$

Ejemplo 3-3. La velocidad de una tabla ($m = 50$g) y la velocidad de un electrón. ($m = 9.1 \times 10^{-28}$ g) se miden y resultan iguales, a 300 m/seg, con una incertidumbre de 0.01%. ¿Cuál será la exactitud fundamental con que se podrá determinar la posición de cada una, si la posición y la velocidad se miden simultáneamente en el mismo experimento?

Para el electrón

$$p = mv = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 300 \text{ m/seg} = 2.7 \times 10^{-28} \text{ kg-m/seg}$$

y

$$\Delta p = m\Delta v = 0.0001 \times 2.7 \times 10^{-28} \text{ kg-m/seg} = 2.7 \times 10^{-32} \text{ kg-m/seg}$$

de modo que;

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi \Delta p} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{4\pi \times 2.7 \times 10^{-32} \text{ kg-m/seg}} = 2 \times 10^{-3} \text{ m} = 0.2 \text{ cm}$$

Para la bala

$$p = mv = 0.05 \text{ kg} \times 300 \text{ m/seg} = 15 \text{ kg-m/seg}$$

y

$$\Delta p = 0.0001 \times 15 \text{ kg-m/seg} = 1.5 \times 10^{-3} \text{ kg-m/seg}$$

de modo que;

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi \Delta p} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{4\pi \times 1.5 \times 10^{-3} \text{ kg-m/seg}} = 3 \times 10^{-32} \text{ m.}$$

Por lo tanto, para objetos macroscópicos, tales como balas, el principio de incertidumbre no impone límites prácticos en el procedimiento de medición, ya que Δx en este caso resulta aproximadamente 10^{-17} veces el diámetro de un núcleo; pero para objetos microscópicos, como electrones, existen límites prácticos, ya que en este ejemplo Δx resulta 10^7 veces el diámetro de un átomo. ◀

3.4 Propiedades de ondas de materia

En esta sección se derivará el principio de incertidumbre combinando las relaciones de de Broglie-Einstein, $p = h/\lambda$ y $E = h\nu$, con propiedades matemáticas simples que son univer-

sales a todas las ondas. Se empezará el desarrollo de estas propiedades llamando la atención a una paradoja aparente.

La velocidad de propagación w para una onda con longitud de onda λ y frecuencia ν, está dada por la relación familiar, que más adelante se verificará

$$w = \lambda\nu \tag{3-8}$$

Evaluando w para una onda de de Broglie asociada con una partícula de impulso p y energía total E se obtiene;

$$w = \lambda\nu = \frac{h}{p}\frac{E}{h} = \frac{E}{p}$$

En seguida se supone que la partícula se mueve a una velocidad v no relativista en una región de energía potencial cero. (La validez de las conclusiones no será limitada por estas suposiciones). Evaluando p y E en términos de v y de la masa m de la partícula se encuentra

$$w = \frac{E}{p} = \frac{mv^2/2}{mv} = \frac{v}{2} \tag{3-9}$$

Este resultado es, en apariencia preocupante, pues parecía que la onda de materia no viaja a la misma velocidad que la partícula que representa, pero en realidad no existe dificultad alguna como se demostrará en la discusión que sigue.

Imagínese a la partícula moviéndose a lo largo del eje x, sin la acción de fuerzas ya que su energía potencial tiene el valor constante cero. También moviéndose a lo largo del eje x se tiene a su onda de materia asociada. Supóngase también, en este experimento de pizarrón, que a lo largo del eje x se han distribuido un conjunto (hipotético) de instrumentos capaces de medir la amplitud de la onda de materia. Para cierto tiempo $t = 0$, se registran las lecturas en estos instrumentos. Los resultados del experimento pueden presentarse en una gráfica de los valores instantáneos de la onda, que se designan por $\Psi(x, t)$, como función de la distancia x, al tiempo fijo $t = 0$. En este momento no se necesita saber mucho acerca de ondas de materia para darse cuenta que *cualitativamente* la gráfica debe asemejarse a la que se muestra en la figura 3-7. La amplitud de la onda de materia, deberá estar modulada de modo tal, que su valor será diferente de cero sólo en una región finita del espacio en la vecindad de la partícula. Esto es necesario porque la onda de materia, de algún modo, debe estar espacialmente asociada con la partícula cuyo movimiento controla. La onda de materia tendrá la forma de un grupo de ondas y a medida que transcurra el tiempo, el grupo seguramente deberá moverse a lo largo del eje x con la misma velocidad que la partícula.

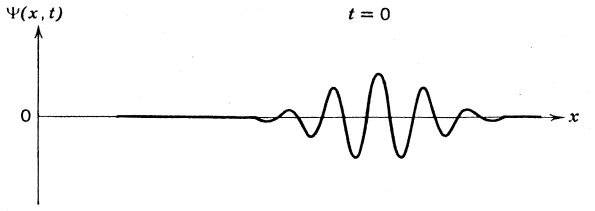


FIGURA 3-7
Una onda de de Broglie para una partícula.

El estudiante podrá recordar, de su estudio del movimiento de ondas clásicas, que para el movimiento de un grupo de ondas es necesario distinguir entre la velocidad g del grupo y la velocidad w, muy diferente, de las oscilaciones de las ondas individuales. Desde luego esto resulta alentador, pero debe demostrarse que g es igual a la velocidad de la partícula. Para esto, se desarrollará una relación entre g y las cantidades ν y λ, comparable con la relación (3-8) entre w y estas cantidades.

Se empezará considerando el caso más simple de movimiento ondulatorio, una onda senoidal de frecuencia ν y longitud de onda λ, que tiene amplitud constante y unitaria desde $-\infty$ hasta $+\infty$, pero que se mueve con velocidad uniforme en la dirección en que x aumenta. Una onda tal, puede representarse matemáticamente por la función:

$$\Psi(x,t) = \operatorname{sen} 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) \tag{3-10a}$$

o en una forma más conveniente

$$\Psi(x,t) = \operatorname{sen} 2\pi(\kappa x - \nu t) \qquad \text{donde } \kappa \equiv 1/\lambda \tag{3-10b}$$

Que lo anterior representa la onda descrita, puede verse de las consideraciones siguientes:

1. Fijando la x, en cualquier valor, se observa que la función oscila senoidalmente con frecuencia ν y amplitud uno.
2. Fijando t, se observa que la función tiene una dependencia senoidal con x, con longitud de onda λ o *longitud de onda recíproca* κ.
3. Los ceros de la función, que corresponden a los nodos de la onda que representa, se encuentran en las posiciones x_n para las cuales

$$2\pi(\kappa x_n - \nu t) = \pi n \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

o

$$x_n = \frac{n}{2\kappa} + \frac{\nu}{\kappa} t$$

Por lo tanto, estos nodos y de hecho todos los puntos sobre la onda se mueven en la dirección en que x crece, con velocidad

$$w = dx_n/dt$$

que es igual a

$$w = \nu/\kappa$$

Nótese que lo anterior es idéntico a (3-8), ya que $\kappa = 1/\lambda$.

En seguida se analizará el caso en que se modula la amplitud de las ondas para formar un grupo. Matemáticamente se puede obtener un grupo de ondas moviéndose en la dirección en que x crece, similar al grupo de ondas de materia que se ilustra en la figura 3-7, sumando un número infinitamente grande de ondas de la forma (3-10b), cada una con frecuencia ν y longitud de onda recíproca κ infinitamente diferentes. (Pronto se explicará cómo sucede lo anterior). Sin embargo, las técnicas matemáticas se complican y para el propósito presente, será suficiente considerar qué sucede si se suman sólo dos de esas ondas. Por lo tanto, se toma

$$\Psi(x,t) = \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t) \tag{3-11}$$

donde

$$\Psi_1(x,t) = \operatorname{sen} 2\pi[\kappa x - \nu t]$$

y

$$\Psi_2(x,t) = \operatorname{sen} 2\pi[(\kappa + d\kappa)x - (\nu + d\nu)t]$$

Ahora bien,

$$\operatorname{sen} A + \operatorname{sen} B = 2 \cos [(A - B)/2] \operatorname{sen}[(A + B)/2]$$

Aplicando lo anterior al caso que nos ocupa, se tiene

$$\Psi(x,t) = 2 \cos 2\pi\left[\frac{d\kappa}{2} x - \frac{d\nu}{2} t\right] \operatorname{sen} 2\pi\left[\frac{(2\kappa + d\kappa)}{2} x - \frac{(2\nu + d\nu)}{2} t\right]$$

como $d\nu \ll 2\nu$ y $d\kappa \ll 2\kappa$, esto es:

$$\Psi(x,t) = 2 \cos 2\pi\left(\frac{d\kappa}{2} x - \frac{d\nu}{2} t\right) \operatorname{sen} 2\pi(\kappa x - \nu t) \tag{3-12}$$

En la figura 3-8 se muestra una gráfica de Ψ (x, t) como función de x para el valor fijo $t = 0$. El segundo término de Ψ (x, t) es una onda de la misma forma que (3-10b), pero modulada por el primer término, de modo que las oscilaciones de Ψ (x, t) caen dentro de la envolvente cuya amplitud varía periódicamente. Dos ondas cuyas longitudes de onda recíproca y frecuencia difieren ligeramente, se interfieren y se refuerzan alternativamente de modo tal que se producen grupos sucesivos. Estos grupos y las ondas individuales que contienen, se mueven en la dirección en que x crece. La velocidad w de las ondas individuales se pueden evaluar considerando el segundo término de Ψ (x, t) y la velocidad g de los grupos se puede evaluar del primer término. Una vez más, procediendo como en la consideración 3, se obtiene

$$w = \frac{\nu}{\kappa} \tag{3-13a}$$

y también el resultado nuevo

$$g = \frac{d\nu/2}{d\kappa/2} = \frac{d\nu}{d\kappa} \tag{3-13b}$$

Para un número infinito de ondas que se combinen para formar un grupo en movimiento, se puede demostrar que la dependencia de la *velocidad de onda* w y la *velocidad de grupo* g con ν, κ y

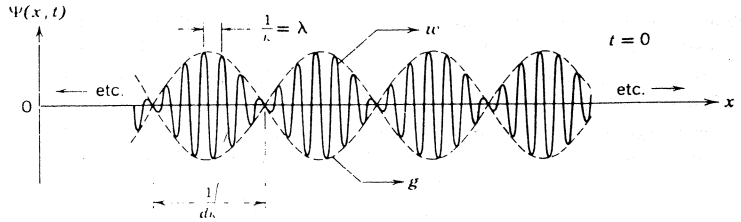


FIGURA 3-8

Suma de dos ondas senoidales de frecuencias y longitudes de onda recíproca κ, ligeramente diferentes.

$dv/d\kappa$ es exactamente la misma que para el caso sencillo que se ha considerado. Las ecuaciones (3-13a) y (3-13b) tienen validez general.

Finalmente, se tienen las condiciones para poder calcular la velocidad de grupo g del grupo de ondas asociado con la partícula en movimiento. De las relaciones de Einstein y de de Broglie se tiene

$$\nu = E/h \qquad \text{y} \qquad \kappa \equiv 1/\lambda = p/h$$

de modo que

$$d\nu = dE/h \qquad \text{y} \qquad d\kappa = dp/h$$

Por lo tanto, la velocidad de grupo es:

$$g = d\nu/d\kappa = dE/dp$$

Igualando

$$E = \frac{mv^2}{2} \qquad \text{y} \qquad p = mv$$

se obtiene

$$\frac{dE}{dp} = \frac{mv\,dv}{m\,dv} = v$$

de donde se obtiene el resultado satisfactorio de

$$g = v$$

La velocidad del grupo de ondas de materia es justamente igual a la velocidad de la partícula que gobiernan, y el postulado de de Broglie es internamente consistente. Utilizando expresiones relativistas para E y p, para evaluar dE/dp, se obtiene la misma conclusión.

A continuación se derivarán las relaciones de incertidumbre, combinando las relaciones de de Broglie-Einstein, $p = h/\lambda$ y $E = h\nu$, con las propiedades de grupos de ondas. Primero se considerará un caso límite simple. Sea λ la longitud de onda de de Broglie asociada con una partícula. Se puede representar una longitud de onda determinada (monocromática) en términos de una onda senoidal simple que se extiende a todos los valores de x, es decir, una onda sin modulación infinitamente larga como

$$\Psi = A \operatorname{sen} 2\pi(\kappa x - \nu t)$$

o

$$\Psi = A \cos 2\pi(\kappa x - \nu t)$$

Si la longitud de onda tiene definitivamente el valor λ, no existe la incertidumbre $\Delta\lambda$ y el impulso asociado a la partícula $p = h/\lambda$ será también definitivo, de modo que $\Delta p_x = 0$. En una onda tal, la amplitud tiene un valor constante A en todas partes; es la misma para toda la gama infinita de x. Por lo tanto, la probabilidad de encontrar a la partícula, que según Born está relacionada con la amplitud de la onda, no está concentrada en un intervalo particular de valores de x. En otras palabras, la posición de la partícula se desconoce totalmente. La partícula puede estar en cualquier parte, de modo que $\Delta x = \infty$. Análogamente se puede afirmar que como $E = h\nu$ y como la frecuencia tiene un valor definido, entonces $\Delta E = 0$. Pero, para asegurar que la amplitud de la onda es perfectamente constante en el tiempo, ésta debe ser observada durante un tiempo infinito, de modo que $\Delta t = \infty$. Para este caso sencillo, se satisface que $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$, y $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$, en los límites $\Delta p_x = 0$, $\Delta x = \infty$, y $\Delta E = 0$, $\Delta t = \infty$.

Para poder tener una onda cuya amplitud varíe con x o t, se deben superponer varias ondas nonocromáticas con longitudes de onda o frecuencias diferentes. Cuando se superponen dos ondas de ese tipo, se obtiene el fenómeno familiar de pulsos, como se vio anteriormente en esta sección, con la amplitud modulada de modo regular a todo tiempo y en todo el espacio. Si se desea construir una onda con extensión determinada en el espacio (un solo grupo con un principio y un fin específico), entonces se deberán superponer ondas senoidales que posean un espectro continuo de longitudes de onda en el intervalo $\Delta\lambda$. La amplitud de un grupo tal, será cero fuera de la región de tamaño Δx

Para visualizar mejor lo anterior, considérese un número finito de ondas senoidales con longitudes de onda λ, o longitudes de onda recíproca κ, ligeramente diferentes. En la figura 3-9 se muestran siete ondas senoidales componentes $\Psi_\kappa = A_\kappa \cos 2\pi(\kappa x - \nu t)$, a tiempo $t = 0$. Las longitudes de onda recíprocas, $\kappa = 1/\lambda$ toman sólo los valores enteros desde $\kappa = 9$ hasta $\kappa = 15$. La amplitud de cada onda está dada por A_κ con $A_{12} = 1$, $A_{13} = A_{11} = 1/2$, $A_{14} = A_{10} = 1/3$, y $A_{15} = A_{19} = 1/4$, tal como se muestra en la figura. El esquema se centra en $x = 0$, donde todas las ondas están en fase (por esta razón se utilizan cosenos), pero ocurren desfasamientos entre ellas, a medida que se desplazan de esa posición, en cualquier dirección. Consecuentemente, su suma $\Psi = \Psi_9 + \cdots + \Psi_{15}$ oscila con máxima amplitud en $x = 0$, pero las oscilaciones decaen al aumentar o disminuir x a medida que las relaciones de fase entre las ondas componentes se complican. Se se adopta la convención usual de definir la extensión del grupo entre el punto de máxima amplitud y aquel cuya amplitud es la mitad de la máxima, entonces la superposición contiene un grupo cuya extensión espacial Δx puede obtenerse de la figura y es ligeramente mayor que $2\pi/12$. Con una convención análoga, el intervalo de longitudes de onda recíprocas que comprenden el grupo de ondas, $\Delta\kappa$ tiene el valor 1. Obsérvese que el valor aproximado del producto $\Delta x \Delta\kappa$ es $\pi/6 \simeq 1/2$. En el extremo derecho de la figura se indica la presencia de un grupo auxiliar, de la misma forma que el grupo central. Estos grupos auxiliares se forman en intervalos uniformemente espaciados a lo largo de las partes positiva y negativa del eje x y ocurren debido a que si se tiene un número finito de ondas componentes, existen puntos en el eje, separados de $x = 0$ por distancias iguales a un número entero diferente de longitudes de onda, para cada componente. En estos puntos las componentes están de nuevo en fase y el grupo se repite. Si en un intervalo fijo de longitudes de onda recíproca $\Delta\kappa$ se duplica el número de ondas componentes, la anchura del grupo central permanecerá esencialmente invariante, pero las distancias que lo separan de los grupos auxiliares se duplicará.

Si se combina un número infinito de ondas senoidales componentes, cada una con una longitud de onda recíproca infinitesimalmente diferente pero contenidas en el intervalo $\kappa = 9$ a $K = 15$, se obtiene un grupo central muy similar al que se muestra en la figura 3-9, pero los grupos auxiliares no estarán presentes. La razón es que en tales casos no existe una longitud en el eje x en la cual encajen un número entero exacto de longitudes de onda para cada una del infinito número de componentes. Todas las componentes están en fase, en y cerca de $x = 0$ y por lo tanto se combinan constructivamente para formar el grupo. Alejándose de este punto en cualquier dirección, las ondas componentes empiezan a desfasarse entre sí, porque sus longitudes de onda o longitudes de onda recíproca son diferentes. Más allá de ciertos puntos, las fases del número infinito de componentes se vuelven aleatorias, y por lo tanto, la suma de las ondas componentes será cero. Además, nunca más volverá a estar en fase. Por lo tanto, las componentes forman un grupo de extensión restringida Δx. Resulta obvio que entre mayor sea el intervalo de longitudes de onda recíproca $\Delta\kappa$ de donde se obtienen las componentes que forman el grupo, menor será la extensión del grupo Δx, la razón es simplemente que si las longitudes de onda cubren un intervalo más amplio, las fases se volverán aleatorias en una distancia muy corta. De hecho, Δx es justamente inversamente proporcional a $\Delta\kappa$. El valor exacto de la constante de proporcionalidad y la forma del grupo de ondas, dependen de las amplitudes relativas de las ondas componentes.

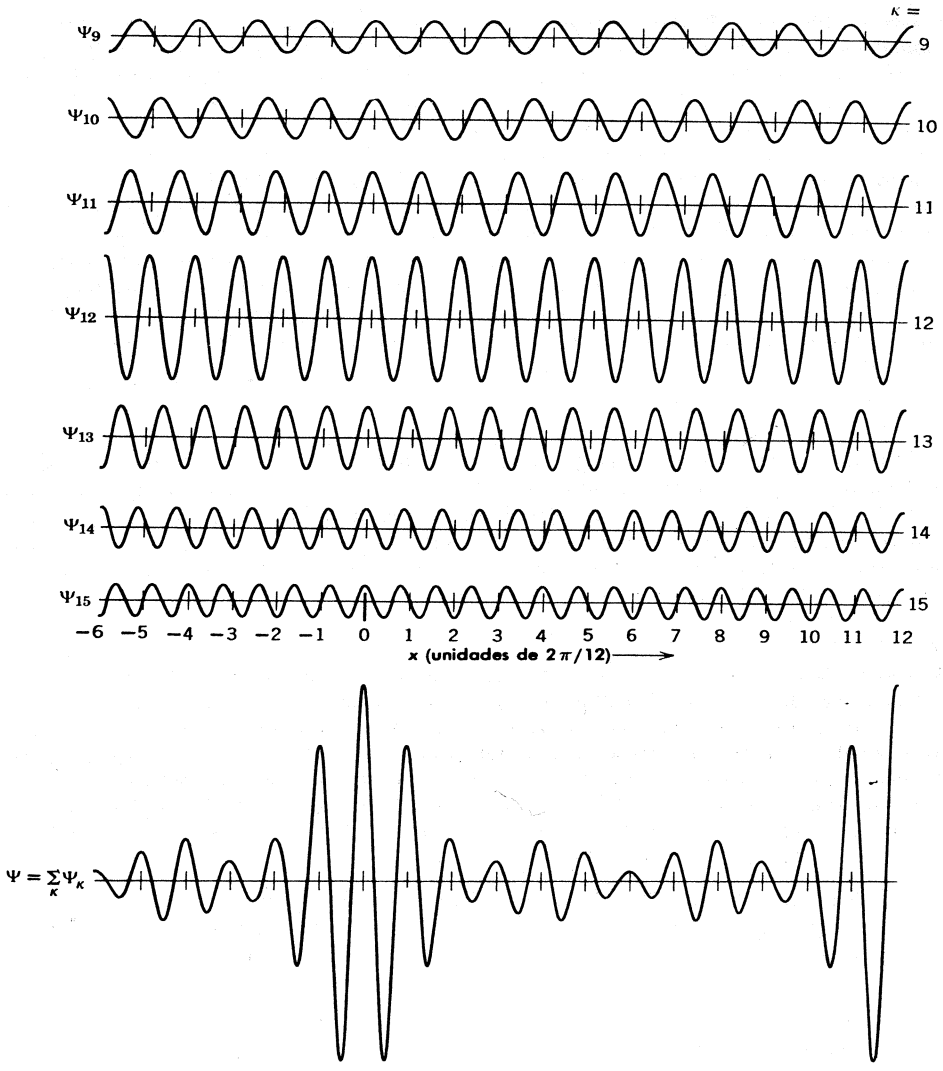


FIGURA 3-9

Se muestra, a $t = 0$, la superposición de siete ondas cosenoidales $\Psi_\kappa = A_\kappa \cos 2\pi(\kappa x - \nu t)$ con longitudes de onda recíprocas uniformemente espaciadas en el intervalo de $\kappa = 9$ a $\kappa = 15$. Sus amplitudes A_κ se maximizan en el valor $A_{12} = 1$ para la onda cuya κ está en el centro del intervalo y decaen simétricamente a los valores 1/2, 1/3, 1/4 para las otras ondas cuyas κ se aproximan a los extremos del intervalo. La suma $\Psi = \sum_\kappa \Psi_\kappa$ de estas ondas, consiste de un grupo centrado en $x = 0$. Definiendo Δx como la anchura entre la amplitud máxima y la mitad de la amplitud máxima de Ψ, y $\Delta\kappa$ se define como el intervalo de longitudes de onda recíprocas de las componentes de Ψ entre la amplitud máxima y la mitad de la amplitud máxima, se tiene $\Delta x \simeq 2\pi/12$, $\Delta\kappa \simeq 1$, y $\Delta x\, \Delta\kappa \simeq \pi/6 \simeq 1/2$.

Las matemáticas que se utilizan para llevar a cabo el procedimiento descrito, involucran la llamada integral de Fourier que es un poco más complicada, pero conducen a resultados numéricos muy similares a los obtenidos de la construcción de la figura 3-9. Es decir

$$\Delta x \Delta \kappa \geq 1/4\pi \tag{3-14}$$

El trabajo *óptimo* que pueda realizarse al formar un grupo de longitud Δx (amplitud media a la mitad de la altura) a partir de componentes cuyas longitudes de onda recíprocas cubren el intervalo $\Delta\kappa$ (mitad de la anchura a la mitad de la amplitud máxima) se obtiene $\Delta x = 1/4\pi\Delta\kappa$, o bien, $\Delta x \Delta\kappa = 1/4\pi$. Generalmente, de este producto se obtiene un valor algo mayor.

Un grupo de ondas que viaje en una región limitada del espacio pasará por algún punto de observación dado, en un tiempo limitado. Si el pulso o grupo de ondas tiene una duración t, entonces, necesariamente deberá componerse de ondas senoidales cuyas frecuencias cubran el intervalo $\Delta\nu$, donde

$$\Delta t \Delta \nu \geq 1/4\pi \tag{3-15}$$

Por lo tanto, la frecuencia del grupo tiene una dispersión $\Delta\nu$ si su duración es Δt, del mismo modo como existe una incertidumbre en su longitud de onda recíproca $\Delta\kappa$ si su anchura es Δx. La ecuación (3-15) también se obtiene de una integral de Fourier y con la ecuación (3-14), constituyen expresiones diferentes de la misma propiedad; sin embargo, para el estudiante será más familiar la relación frecuencia-tiempo o al menos algunas de sus implicaciones, como se muestra en el siguiente ejemplo.

Ejemplo 3-4. La señal de una estación de televisión consiste de pulsos cuya duración es $\Delta t \sim 10^{-6}$ seg. Explique por qué no es factible transmitir televisión en la banda AM.

El intervalo de frecuencias presentes en la señal, utilizando (3-15), es $\Delta\nu \sim 1/10^{-6}$ seg $= 10^6$ seg$^{-1} = 10^6$ Hz. Por lo tanto, la banda de transmisión en su totalidad ($\nu \simeq 0.5\times10^6$ Hz a $\nu \simeq 1.5\times10^6$ Hz) sería capaz de aceptar un solo "canal" de televisión. También se tendrían problemas serios con la construcción de transmisores y receptores con una banda fraccional tan amplia. A las frecuencias que se utilizan en transmisión de televisión ($\nu \simeq 10^8$ Hz) se pueden tener muchos canales en una región razonable del espectro, y sólo se requiere una *banda* nominal. ◀

Las ecuaciones (3-14) y (3-15) son *propiedades universales de todas las ondas* y se aplican a las ondas de materia, en combinación con las relaciones de de Broglie-Einstein, inmediatamente se obtienen las relaciones de incertidumbre de Heisenberg. Es decir, si en:

$$\Delta x \Delta \kappa = \Delta x \Delta(1/\lambda) \geq 1/4\pi$$

se sustituye $p = h/\lambda$ o $1/\lambda = p/h$,

$$\Delta x \Delta(p/h) = (1/h)\,\Delta x \Delta p \geq 1/4\pi$$

o

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2 \tag{3-16}$$

y si en

$$\Delta t \Delta \nu \geq 1/4\pi$$

se sustituye $E = h\nu$ o $\nu = E/h$, se obtiene

$$\Delta t \Delta(E/h) = (1/h)\,\Delta t \Delta E \geq 1/4\pi$$

o

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2 \tag{3-17}$$

Estos resultados concuerdan con las definiciones originales (3-5) y (3-6).

Resumiendo, se ha visto que en mediciones físicas, necesariamente se implica una interacción entre el observador y el sistema bajo observación. Para medidas de ese tipo, los entes disponibles son la materia y la radiación. Las relaciones $p = h/\lambda$ y $E = h\nu$, se aplican tanto a la radiación como a la materia, constituyendo así la expresión de la dualidad onda-partícula. Cuando estas relaciones se combinan con las propiedades universales a todas las ondas, se obtienen las relaciones de incertidumbre. Por lo tanto, el principio de incertidumbre es una consecuencia necesaria de esta dualidad, es decir, de las relaciones de de Broglie-Einstein; y el principio de incertidumbre en sí constituye la base de la tesis de Heisenberg-Bohr de que la probabilidad es fundamental para la física cuántica.

Ejemplo 3-5. Un átomo puede radiar en cualquier momento después de ser excitado. En un caso típico, se encuentra que la vida media de un átomo excitado promedio es de 10^{-8} seg. Es decir, durante este tiempo emite un fotón y sale de su estado de excitación.

(a) ¿Cuál es la incertidumbre $\Delta\nu$ mínima en la frecuencia del fotón?

De (3-15) se tiene

$$\Delta\nu\Delta t \geq 1/4\pi$$

o

$$\Delta\nu \geq 1/4\pi\Delta t$$

con $\Delta t = 10^{-8}$ seg, se obtiene $\Delta\nu \geq 8 \times 10^{6}$ seg^{-1}.

(b) En átomos de sodio, la mayoría de los fotones corresponden a dos líneas espectrales de aproximadamente λ=5890 Å. ¿Cuál será la fracción de la amplitud $\Delta\nu/\nu$ correspondiente a cada línea?

Para $\lambda = 5890$ Å se obtiene $\nu = c/\lambda = 3 \times 10^{10}$ cm-seg$^{-1}/5890\times10^{-8}$ cm $= 5.1\times10^{14}$ seg^{-1}. Por lo tanto $\Delta\nu/\nu = 8\times10^{6}$ seg$^{-1}/5.1\times10^{14}$ seg^{-1} $= 1.6 \times 10^{-8}$ o aproximadamente 2 partes en 100 millones.

Esta es la llamada *amplitud natural* de la línea espectral. En la práctica, la línea es mucho más gruesa por el ensanchamiento Doppler y el ensanchamiento por presión debidos al movimiento y a las colisiones de los átomos en la fuente.

(c) Calcule la incertidumbre en la energía ΔE, del estado excitado del átomo.

La energía del estado excitado no se puede medir con precisión ya que sólo se tiene un tiempo finito para realizar la medida. Es decir, el átomo no permanece en el estado excitado un tiempo infinito, sino que decae a su estado de más baja energía y en ese proceso emite un fotón. De acuerdo con el principio de conservación de la energía, la dispersión en la energía del fotón debe ser igual a la dispersión en la energía del estado excitado del átomo. Si Δt es igual a la vida media del estado excitado, de (3-17) se tiene

$$\Delta E \geq \frac{h/4\pi}{\Delta t} = \frac{h}{4\pi\Delta t} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{4\pi \times 10^{-8} \text{ seg}}$$

$$= \frac{4.14 \times 10^{-15} \text{ eV-seg}}{4\pi \times 10^{-8} \text{ seg}} \simeq 3.3 \times 10^{-8} \text{ eV}$$

Desde luego que lo anterior concuerda con lo obtenido en la parte (a), multiplicando la incertidumbre en la frecuencia del fotón $\Delta\nu$ por h para obtener $\Delta E = h\Delta\nu$.

La dispersión en energía de un estado excitado, por lo general se le llama *amplitud* del estado.

(d) De los resultados anteriores, determine la energía del estado excitado del átomo de sodio, hasta una precisión ΔE, con respecto a la energía de su estado más bajo, que emite un fotón cuya longitud de onda está centrada en 5890 Å.

Se tiene $\Delta\nu/\nu = h\Delta\nu/h\nu = \Delta E/E$. Por lo tanto $E = \Delta E/(\Delta\nu/\nu) = 3.3\times10^{-8}$ eV$/1.6\times10^{-8} = 2.1$ eV, para lo cual se han utilizado los cálculos de las partes (b) y (c). ◀

Ejemplo 3-6. Se hace una medida de la coordenada y de un electrón que pertenece a un ancho haz de electrones que se mueven en la dirección x, introduciendo en el haz una rendija angosta de amplitud Δy.

Demuestre que como resultado, se introduce una incertidumbre Δp_y en la componente y del impulso del electrón, de modo tal que $\Delta p_y \Delta y \geq \hbar/2$, como lo requiere el principio de incertidumbre. Efectúelo, considerando la difracción de la onda asociada con el electrón.

La onda, al propagarse por el aparato que se muestra en la figura 3-10, será difractada por la rendija. El ángulo θ correspondiente al primer mínimo del patrón de difracción de "una sola rendija", que se bosqueja en la figura, está dado por $\operatorname{sen}\theta = \lambda/\Delta y$. (Este es otro ejemplo de la relación general $\theta \simeq \lambda/a$ entre el ángulo de difracción, longitud de onda y dimensión característica del aparato de difracción). Como la propagación de la onda gobierna el movimiento de la partícula asociada, el patrón de difracción también da las probabilidades relativas de que los electrones lleguen a los diferentes puntos de la placa fotográfica. Por lo tanto, el electrón que pase por la rendija será deflectado por un ángulo que esté entre $-\theta$ y $+\theta$. A pesar de que su componente y del impulso había sido determinada con gran precisión igual a cero, antes de que pasara por la rendija (porque se sabía muy poco acerca de su posición y), después de atravesar la rendija, donde se realiza la medida de la posición y el impulso y puede ser cualquiera en el intervalo de $-p_y$ a $+p_y$, donde $\operatorname{sen}\theta = p_y/p$. De modo que la incertidumbre en el impulso y del electrón se debe a la medida de la posición y por la difracción de la onda electrónica.

La incertidumbre es:

$$\Delta p_y \simeq p_y = p \operatorname{sen}\theta = p\lambda/\Delta y$$

Usando la relación de de Broglie $p = h/\lambda$ para conectar el impulso de la partícula con la longitud de onda de la onda, se obtiene:

$$\Delta p_y = h/\Delta y$$

o

$$\Delta p_y \Delta y = h$$

Este resultado concuerda con el límite impuesto por el principio de incertidumbre. La difracción, que implica ondas, y el principio de incertidumbre que se refiere a partículas, proveen modos alternativos aunque equivalentes de tratar éste y todos los problemas similares. ◀

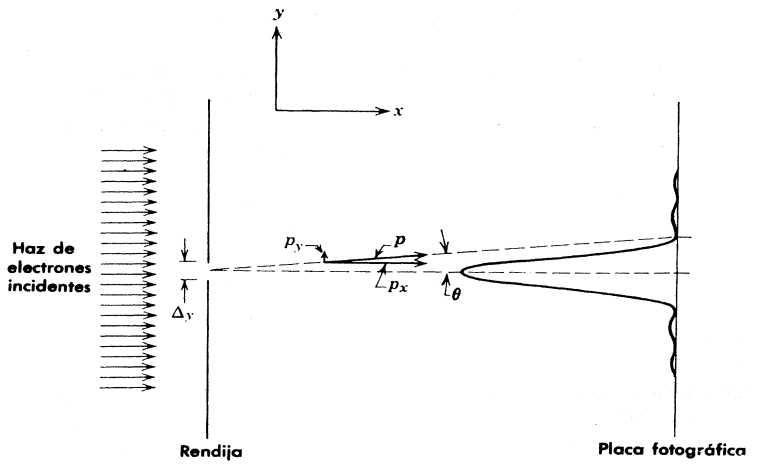


FIGURA 3-10

Medida de la coordenada y de un electrón en un haz paralelo y ancho, que se requiere que pase a través de una rendija. Se indica el patrón de difracción de la onda electrónica difractada, utilizando la línea que representa a la placa fotografiada, como un eje de la gráfica del patrón.

Obsérvese que en el ejemplo 3-6, se considera que la onda asociada con *un solo* electrón se difracta. La probabilidad de que el electrón pegue en algún punto de la placa fotográfica se determina por la intensidad de la onda electrónica. Si es sólo un electrón el que pasa por el aparato, podrá pegar en cualquier lugar del patrón de difracción, excepto en los puntos correspondientes a intensidad cero y seguramente pegará en algún punto cercano al máximo principal. Si son muchos los electrones que pasan por el aparato, cada una de sus ondas es difractada independientemente y los puntos sobre la placa fotográfica se distribuyen siguiendo el mismo patrón. El hecho de que los fenómenos de difracción impliquen interferencia entre partes diferentes de la onda correspondiente a una partícula y no a interferencia entre partes diferentes de ondas correspondientes a diferentes partículas, fue demostrado experimentalmente por primera vez, por G.I. Taylor para el caso de fotones y ondas de luz. Obtuvo un patrón de difracción utilizando luz de tan baja intensidad que los fotones pasaban por el aparato de difracción uno a uno, requiriendo para ello tiempos de exposición largos. Entonces, subiendo la intensidad a niveles normales de modo que hubiese muchos fotones en el aparato a cualquier tiempo, obtuvo el mismo patrón de difracción. Este mismo experimento ha sido esencialmente repetido posteriormente para electrones y otras partículas.

3.5 Algunas consecuencias del principio de incertidumbre

El principio de incertidumbre permite entender por qué es posible la naturalezadual (onda-partícula) de la radiación y la materia. Si se trata de determinar experimentalmente, si la radiación es una onda o una partícula, se encuentra que un experimento que fuerce a la radiación a revelar su carácter ondulatorio, suprime fuertemente su carácter corpuscular. Si el experimento se modifica para que revele el carácter corpuscular, se suprimen las características ondulatorias. En una misma situación experimental, no es posible confrontar los aspectos ondulatorio y corpuscular. Tanto la radiación como la materia semejan monedas que pueden desplegar una u otra cara a voluntad, pero nunca ambas simultáneamente. Desde luego que esta es la esencia del principio de complementaridad de Bohr; los conceptos de onda y partícula en lugar de contradecirse, se complementan.

Considérese el experimento de Young, de interferencia de luz por dos rendijas. Desde el punto de vista ondulatorio, la onda original es dividida en dos frentes de onda coherentes por las rendijas, y el traslape de estos frentes de onda es lo que produce las franjas de interferencia en la pantalla, que son características de todo fenómeno ondulatorio. Ahora supóngase que se sustituye la pantalla por una superficie fotoeléctrica. Si se mide el lugar de la superficie donde son emitidos los fotoelectrones, se obtiene un patrón de intensidades correspondiente al de dos rendijas presentándose así, aparentemente, aspectos ondulatorios. Sin embargo, si se mide las distribuciones de energía y tiempo de los fotoelectrones emitidos, se obtienen evidencias que demuestran que la radiación consiste de fotones, de modo que los aspectos corpusculares parecerán estar presentes. Si después se piensa en la radiación como fotones cuyo movimiento está gobernado por las propiedades de propagación de ciertas ondas asociadas (de Broglie), se llega a otra paradoja aparente. Cada fotón deberá pasar por una u otra rendija; si este es el caso, ¿cómo es posible que su movimiento más allá de las rendijas sea influenciado por la interacción de sus ondas asociadas con una rendija por la cual no pasó?

El error en el razonamiento de la paradoja se encuentra en la afirmación de que el fotón debe pasar por una u otra rendija. ¿Cómo puede determinarse realmente, en un experimento, si un fotón que se detecta en la pantalla, pasó por la rendija de arriba o la de abajo? Para poderlo hacer sería necesario colocar un detector en cada rendija, pero el detector que interacciona con el fotón en la rendija lo saca de la trayectoria que de otra forma seguiría. Por el principio de incertidumbre, se puede demostrar que un detector que posea suficiente resolución espacial como para poder determinar por cuál rendija pasa el fotón, perturba tanto su impulso que destruye el patrón de interferencia por dos rendijas. En otras palabras, si de algún modo se

demuestra que el fotón pasó por una rendija o la otra, entonces ya no se tendrá un patrón de interferencia. Si se desea observar el patrón de interferencia, debe evitarse perturbar a los fotones y no tratar de observarlos como partículas a lo largo de sus trayectorias hacia la pantalla. Se puede observar el comportamiento ondulatorio o corpuscular de la radiación; sin embargo, el principio de incertidumbre impide que se observen ambos al mismo tiempo, de modo que este comportamiento dual en realidad no es contradictorio. Esto también es aplicable al comportamiento onda-partícula de la materia.

El principio de incertidumbre también hace evidente la necesidad de que los sistemas cuánticos se expresen en términos de probabilidad. En la mecánica clásica, si se conoce exactamente la posición y el impulso de cada partícula, en algún instante, en un sistema aislado, entonces se puede predecir el comportamiento exacto de las partículas del sistema, en todo tiempo futuro; sin embargo en mecánica cuántica, el principio de incertidumbre muestra que lo anterior es imposible de hacer en sistemas que implican distancias e impulsos pequeños, ya que es imposible saber con la precisión requerida, las posiciones e impulsos instantáneos de las partículas. Consecuentemente, sólo se podrán predecir comportamientos *probables* de estas partículas.

Ejemplo 3-7. Considere una partícula microscópica que se mueve libremente a lo largo del eje x. Suponga que en el instante $t = 0$, se mide la posición de la partícula con una incertidumbre Δx_0. Calcule la incertidumbre en la posición de la partícula a un tiempo t posterior.

La incertidumbre en el impulso de la partícula, a $t = 0$, es al menos

$$\Delta p_x = \hbar/2\Delta x_0$$

Por lo tanto, la velocidad de la partícula, en ese instante, será incierta por lo menos

$$\Delta v_x = \Delta p_x/m = \hbar/2m\Delta x_0$$

y la distancia x que viajó la partícula en el tiempo t no podrá conocerse con mayor precisión que

$$\Delta x = t\Delta v_x = \hbar t/2m\Delta x_0$$

Si por una medida a $t = 0$, se localiza a la partícula dentro de un intervalo Δx_0, entonces, si se realiza una medida de su posición al tiempo t, la partícula podría encontrarse en un intervalo al menos tan grande como Δx.

Obsérvese que Δx es inversamente proporcional a Δx_0, de modo que entre *más* localizada esté la partícula en el instante inicial, será *menos* lo que se pueda saber de su posición final. Además, la incertidumbre Δx aumenta linealmente con el tiempo t. Esto corresponde a una dispersión, a medida que transcurre el tiempo del grupo de ondas asociado con el movimiento de la partícula. ◀

3.6 Filosofía de la teoría cuántica

A pesar de que existe un acuerdo entre todos los físicos, de que la teoría cuántica funciona en el sentido de que predice resultados que concuerdan en forma excelente con el experimento, existe una controversia cada vez mayor en cuanto a sus fundamentos filosóficos. Neils Bohr ha sido el principal arquitecto de la interpretación actual de la mecánica cuántica, conocida como la *interpretación de Copenhague*. Su enfoque ha sido apoyado por la gran mayoría de los físicos teóricos de hoy. Sin embargo, un grupo numeroso de físicos, no todos de acuerdo entre sí, han cuestionado la interpretación de Copenhague. El principal crítico de esta interpretación fue Albert Einstein. Los debates Einstein-Bohr constituyen una parte fascinante de la historia de la física. Bohr consideraba que había podido enfrentar todos los retos que inventó Einstein a manera de experimentos de pizarrón que tenían por objeto refutar el principio de incertidumbre.

Finalmente, Einstein aceptó que la teoría poseía consistencia lógica y su concordancia con los hechos experimentales, pero permaneció firme hasta el final, sin convencerse de que ello representara la realidad física última y dijo: " Dios no juega a los dados con el universo", refiriéndose a que la mecánica cuántica abandonaba los eventos individuales y la causalidad estricta, en favor de una interpretación fundamentalmente estadística.

Heisenberg ha afirmado el punto de vista comúnmente aceptado en forma concreta: "No hemos supuesto que la teoría cuántica, en forma opuesta a la teoría clásica, sea esencialmente una teoría estadística, en el sentido de que de los datos exactos sólo se puedan obtener conclusiones estadísticas.... En la formulación de la ley causal, a saber, si sabemos el presente exactamente, podemos predecir el futuro, no es la conclusión sino la premisa la que es falsa. No *podemos* saber, como cuestión de principio, el presente en todos sus detalles".

Entre los críticos del punto de vista de Bohr-Heisenberg de una indeterminación fundamental en la física, está Louis de Broglie. En un prólogo a un libro de David Bohm, joven colega de Einstein cuyos intentos de una teoría nueva revivieron el interés por reexaminar las bases filosóficas de la teoría cuántica, de Broglie escribe: "Razonablemente podemos aceptar que la actitud adoptada, por más de 30 años, por físicos teóricos cuánticos es, al menos en apariencia, la contraparte exacta de la información del mundo atómico que nos ha dado la experimentación. Al nivel de investigación que se tiene actualmente en microfísica, es cierto que los métodos de medición, no nos permiten determinar simultáneamente todas las cantidades que serían necesarias para obtener una visión de los corpúsculos de tipo clásico (esto se puede deducir del principio de incertidumbre de Heisenberg) y que las perturbaciones introducidas por la medición, que son imposibles de eliminar, en general nos impiden predecir el resultado que producirán y permiten sólo predicciones estadísticas. Por lo tanto, la construcción de fórmulas puramente probabilísticas, que todos los teóricos usan actualmente, fue completamente justificada. Sin embargo, la mayoría de ellos, muchas veces bajo la influencia de ideas preconcebidas derivadas de la doctrina positivista, han pensado que podrían ir más allá y afirmar que el carácter incierto e incompleto del conocimiento que la experimentación, en su estado actual, nos proveé de lo que realmente ocurre en microfísica, es el resultado de una indeterminación real de los estados físicos y su evolución. Tal extrapolación de ninguna manera parece ser justificada. Es posible que en el futuro, examinando a un nivel más profundo la realidad física, seamos capaces de interpretar las leyes de probabilidad y física cuántica como los resultados estadísticos del desarrollo de variables completamente determinadas que actualmente se encuentran ocultas a nosotros. Puede ser que los poderosos medios que empezamos a usar para romper la estructura nuclear y para que aparezcan nuevas partículas, nos den algún día un conocimiento directo que actualmente no tenemos a este nivel más profundo. Tratar de impedir todo intento de ir más allá del punto de vista actual sobre la física cuántica, podría ser muy peligroso para el progreso de la ciencia y además sería contrario a las lecciones que podemos aprender de la historia de la ciencia. En efecto, esto nos enseña que el estado actual de nuestro conocimiento es siempre provisional y que deben existir, más allá de lo que actualmente se conoce, inmensas regiones nuevas que descubrir". (*Tomado de Causality and Chance in Modern Physics* por David Bohm, © 1957 D. Bohm; reimpreso con permiso de D. Van Nostrand Co.).

El estudiante deberá notar aquí la aceptación de que la mecánica cuántica es correcta al nivel atómico y nuclear. La búsqueda de un nivel más profundo, donde la mecánica cuántica podría ser superada, es motivada mucho más por la objeción a su indeterminismo filosófico, que por otras consideraciones. De acuerdo con Einstein, "La creencia en un mundo externo independiente del sujeto que lo percibe es la base de toda la ciencia natural". Sin embargo, la mecánica cuántica considera las interacciones entre objeto y observador como la realidad última. Utiliza el lenguaje de las relaciones físicas y procesos en lugar de el de las cualidades y propiedades físicas. Rechaza, por insignificante e inútil, el concepto de que detrás del universo de nuestra percepción se encuentre oculto un mundo objetivo gobernado por la causalidad; en cambio, se

confina a la descripción de las relaciones entre percepciones. De todas maneras, existen muchos que rehusan dejar de atribuir propiedades objetivas a las partículas elementales, por ejemplo, y trabajar con el conocimiento subjetivo acerca de ellas, lo cual motiva su investigación por una teoría nueva. De acuerdo con de Broglie, tal investigación es en el interés de la ciencia. Que lo anterior lleve a una nueva teoría que en algún campo actualmente inexplorado contradiga a la mecánica cuántica y altere también sus fundamentos filosóficos, nadie lo sabe.

PREGUNTAS

1. ¿Por qué la naturaleza ondulatoria de la materia no es más evidente en nuestras observaciones cotidianas?

2. ¿La longitud de onda de de Broglie solamente se aplica a "partículas elementales", tales como el electrón o el neutrón, o se aplica también a sistemas de materia complejos que poseen una estructura interna? Dé ejemplos.

3. Si en la fórmula de de Broglie, se hace $m \to \infty$, ¿se obtiene el resultado clásico para partículas macroscópicas?

4. ¿La longitud de onda de de Broglie puede ser menor que una dimensión lineal de la partícula? ¿Mayor? ¿Necesariamente existe una relación entre tales cantidades?

5. ¿La frecuencia de una onda de de Broglie se obtiene de E/h? ¿La velocidad es igual a $\lambda\nu$? ¿La velocidad es igual a c? Explique su respuesta:

6. ¿Se puede medir la frecuencia ν de una onda de de Broglie? Si la respuesta es afirmativa diga cómo.

7. ¿Cómo es que la difracción de electrones se puede utilizar para estudiar las propiedades de la superficie de un sólido?

8. ¿Cómo se explican los haces reflejados de modo regular en experimentos de difracción de electrones y átomos?

9. ¿Debe modificarse la fórmula de Bragg para electrones, para poder tomar en cuenta la refracción de ondas electrónicas en la superficie del cristal?

10. ¿Se obtiene una información diferente acerca de los cristales por medio de experimentos de difracción de electrones que por difracción de rayos X? ¿Dé experimentos de difracción de neutrones? Analícelo.

11. ¿Se podrían realizar estudios cristalográficos con protones? ; ¿con neutrones?

12. Analice la analogía: la óptica física es a la óptica geométrica como la mecánica ondulatoria es a la mecánica clásica.

13. ¿Es un electrón una partícula? ¿es una onda? Explique su respuesta.

14. ¿La longitud de onda de de Broglie asociada a una partícula del movimiento del sistema de referencia depende del observador? ¿Qué efectos tiene ésto, en la dualidad onda-partícula?

15. Dé ejemplos de cómo el proceso de medición perturba al sistema que se mide.

16. Demuestre la relación entre la naturaleza incontrolable del retroceso de Compton en el experimento del microscopio de rayos γ de Bohr y el hecho de que existen cuatro incógnitas y sólo tres ecuaciones de conservación en el efecto Compton.

17. Algunas veces, el principio de incertidumbre se enuncia en términos de cantidades angulares como $\Delta L_\varphi \Delta\varphi \geq \hbar/2$ donde ΔL_φ es la incertidumbre en una componente de impulso *angular* y $\Delta\varphi$ es la

incertidumbre correspondiente a la posición *angular*. En algunos sistemas mecánico-cuánticos, al medirse el impulso angular se encuentra que su magnitud tiene un valor determinado (cuantizado). ¿Contradice esto esta definición del principio de incertidumbre?

18. A partir del principio de incertidumbre de Heisenberg, argumente por qué la energía más baja de un oscilador no puede ser cero.

19. Discuta diferencias y semejanzas entre ondas de materia y ondas electromagnéticas.

20. Explique cualitativamente los resultados del ejemplo 3-7, de que la incertidumbre en la posición de una partícula aumenta entre más exactamente se localice a la partícula inicialmente y que la incertidumbre aumenta con el tiempo.

21. ¿Se simplifica o se complica la física cuántica, por el hecho de que la interferencia ocurre entre varias partes de la onda asociada con *una sola* partícula (como en los experimentos de G.I. Taylor)?

22. Los juegos de azar contienen eventos gobernados por la estadística. ¿Violan esos juegos la determinación exacta de tales eventos? ¿Se viola la ley de causa y efecto?

23. De acuerdo con la filosofía operacional, si no se puede prescribir una operación factible para determinar una cantidad física, esa cantidad debería olvidarse por no tener significado físico. En su opinión, ¿cuáles son los méritos y las desventajas de este punto de vista?

24. Bohm y de Broglie sugieren que puede haber variables ocultas a un nivel más profundo que la teoría uántica, que estén determinadas estrictamente. Obtenga una analogía con la relación entre la mecánica estadística y la ley de movimiento de Newton.

25. En su opinión, ¿existe una realidad física objetiva independiente de las impresiones sensoriales subjetivas? ¿Cómo contestarán esta pregunta los defensores de la interpretación de Copenhague? ¿Los críticos de la interpretación de Copenhague?

26. Las experiencias cotidianas: ¿limitan en principio nuestros conceptos o sólo son el punto de arranque conceptual? ¿Cómo se relaciona esta pregunta con una solución a la dualidad onda-partícula?

PROBLEMAS

1. Una bala de 40g. viaja a 1000 m/seg. (a) ¿Qué longitud de onda se le puede asociar? (b) ¿Por qué no se revela la naturaleza ondulatoria de la bala por medio de efectos de difracción?

2. La longitud de onda de la emisión amarilla del sodio es 5890 Å. ¿A qué energía cinética tendría un electrón la misma longitud de onda de de Broglie?

3. Un electrón y un fotón tienen cada uno una longitud de onda de 2.0 Å. ¿Cuáles son sus (a) impulsos y (b) energías totales? (c) Compare las energías cinéticas del fotón y el electrón.

4. Un neutrón térmico tiene una energía cinética de $(3/2)kT$ donde T es la temperatura ambiente 300°K. Tales neutrones están en equilibrio térmico con derredores normales. (a) ¿Cuál es la energía en electrón-volts de un neutrón térmico? (b) ¿Cuál será su longitud de onda de de Broglie?

5. Demuestre que la longitud de onda de de Broglie de una partícula, de carga e, masa en reposo m_0, moviéndose a velocidades relativas, se obtiene como función del potencial de aceleración V, como

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eV}}\left(1 + \frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}$$

(b) Demuestre que esto concuerda con $\lambda = h/p$ en el límite no relativista.

6. Determine la energía, en electrón-volts, para la cual la expresión no relativista para la longitud de onda de de Broglie dará un error de 1%, para (a) un electrón y (b) un neutrón. (Sugerencia: ver el problema 5).

7. El acelerador de electrones de 50-GeV (i.e. 50×10^9 eV) de la Universidad de Stanford, proporciona un haz de electrones con longitud de onda muy corta, adecuados para sondear los detalles finos de la estructura nuclear, por medio de experimentos de dispersión. ¿Cuál es esta longitud de onda y cómo se compara con las dimensiones de un núcleo promedio? (Sugerencia: A estas energías, es más sencillo utilizar la relación relativista extrema entre la energía y el impulso, a saber $p = E/c$. Esta es la misma relación utilizada para fotones y se justifica siempre que la energía cinética de una partícula sea mucho mayor que su energía en reposo m_0c^2, como en este caso).

8. Hacer una gráfica de longitud de onda de de Broglie contra la energía cinética para (a) electrones y (b) protones. Restrinja el intervalo de valores de la energía a aquellos en los cuales la mecánica clásica se aplica razonablemente bien. Un criterio conveniente es que la energía cinética en cada gráfica, sólo sea aproximadamente el 5% de la energía en reposo m_0c^2 de la partícula.

9. En el experimento de Davisson y Germer, (a) demuestre que los haces difractados de segundo y tercer orden que corresponden al primer máximo intenso de la figura 3-2, no pueden ocurrir, y (b) encuentre el ángulo al cual ocurrirá el haz difractado de primer orden, si se cambiara el potencial de aceleración de 54 a 60V. (c) ¿Cuál será la diferencia de potencial necesaria para producir un haz difractado de segundo orden a 50°?

10. ¿Cuál es la longitud de onda de un átomo de hidrógeno que se mueve con una velocidad correspondiente a la energía cinética promedio para equilibrio térmico a 20°C?

11. El espaciamiento principal entre planos de un cristal de cloruro de potasio es 3.14 Å. Compare el ángulo para una reflexión de Bragg de primer orden de estos planos, de electrones con energía cinética de 40 keV con el correspondiente a fotones de 40 keV.

12. Los electrones incidentes sobre un cristal sufren refracción debido a un potencial atractivo de aproximadamente 15V, que los cristales presentan a los electrones (debido a los iones en la red cristalina). Si el ángulo de incidencia de un haz de electrones es 45° y los electrones tienen una energía incidente de 100 eV, ¿cuál es el ángulo de refracción?

13. ¿Cuál sería el voltaje de aceleración necesario para que los electrones en un microscopio electrónico puedan obtener el mismo máximo poder de resolución que se podría obtener con un "microscopio de rayos γ que utilice rayos γ de 0.2 MeV?

14. El poder de resolución más alto posible de un microscopio se limita solamente por la longitud de onda que utilice; es decir, el detalle más fino que puede ser separado es aproximadamente igual a la longitud de onda. Supóngase que se quiera "ver" dentro de un átomo. Suponiendo que el diámetro de un átomo es 1.0 Å, esto quiere decir que es necesario resolver detalles con separación de aproximadamente 0.1 Å, (a) Si se utiliza un microscopio electrónico, ¿cuál será la energía mínima de los electrones que se requieren? (b) Si se utiliza un microscopio de fotones, ¿cuál será la energía requerida de los fotones? ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentran estos fotones? (c) ¿Qué microscopio resulta más práctico para este propósito? Explique su respuesta.

15. Demuestre que para una partícula libre, la relación de incertidumbre puede escribirse como:

$$\Delta\lambda\Delta x \geq \lambda^2/4\pi$$

donde Δx es la incertidumbre en la posición de la onda y $\Delta\lambda$ la incertidumbre simultánea en la longitud de onda.

16. Si $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-7}$ para un fotón, ¿cuál es el valor simultáneo de Δx para (a) $\lambda = 5.00 \times 10^{-4}$ Å (rayos γ)? (b) $\lambda = 5.00$ Å ¿(rayos X)? (c) $\lambda = 5000$ Å (luz)?

17. En una repetición del experimento de Thomson para medir e/m de un electrón, un haz de electrones de 10^4 eV se colima haciéndolo pasar por una rendija de anchura 0.50 mm. ¿Por qué no se destruye el carácter de haz de los electrones emergentes por difracción de la onda electrónica en la rendija?

18. Un electrón de 1 MeV deja una traza en una cámara de niebla. La traza es una serie de gotas de agua de aproximadamente 10^{-5} m de diámetro cada una. Demuestre de la razón de incertidumbre del impulso transversal al del impulso del electrñn, que la trayectoria de los electrones no debería diferir mucho de una línea recta.

19. Demuestre que si la incertidumbre en la posición de una partícula, es aproximadamente igual a su longitud de onda de de Broglie, entonces la incertidumbre en su velocidad es igual a su velocidad.

20. (a) Demuestre que la incertidumbre más pequeña posible en la posición de un electrón cuya velocidad está dada por $\beta = v/c$ es

$$\Delta x_{\min} = \frac{h}{4\pi m_0 c}(1 - \beta^2)^{1/2} = \frac{\lambda_C}{4\pi}\sqrt{1 - \beta^2}$$

donde λ_C es la longitud de onda de Compton h/m_0c. (b) ¿Cuál es el significado de esta ecuación para $\beta = 0$ ¿Para $\beta = 1$?

21. Un microscopio de fotones es utilizado para localizar un electrón dentro de una distancia de 0.2Å ¿Cuál será la incertidumbre en la velocidad de un electrón localizado de este modo?

22. (a) Considere un electrón cuya posición está en algún lugar de un átomo de 1 Å de diámetro. ¿Cuál es la incertidumbre en el impulso del electrón? ¿Es esto consistente con la energía de amarre de electrones en átomos? (b) Imagine que un electrón se encuentra en algún lugar dentro de un núcleo de diámetro 10^{-12} seg. ¿Cuál será la incertidumbre en el impulso del electrón? ¿Es esto consistente con la energía de amarre de los constituyentes nucleares? (c) Considere ahora un protón o un neutrón en ese núcleo. ¿Cuál será la incertidumbre en el impulso del neutrón o del protón? ¿Es esto consistente con la energía de amarre de los constituyentes nucleares?

23. La vida media de un estado excitado de un núcleo es, generalmente, 10^{-12} seg. ¿Cuál será la incertidumbre en la energía del fotón de rayos γ emitido?

24. Utilizando expresiones relativistas para la energía e impulso totales, verificar que la velocidad g de una onda de materia, es igual a la velocidad v de la partícula asociada.

25. La energía de un oscilador armónico lineal es $E = p_x^2/2m + Cx^2/2$. (a) Utilizando la relación de incertidumbre, demuestre que lo anterior se puede escribir como

$$E = \frac{h^2}{32\pi^2 m x^2} + \frac{Cx^2}{2}$$

(b) Después, demuestre que la energía mínima del oscilador es $h\nu/2$ donde

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{C}{m}}$$

es la frecuencia de oscilación. (Sugerencia: este resultado depende de que el producto $\Delta x \Delta p_x$ alcance su valor máximo $\hbar/2$. Encuentre E en términos de Δx y Δp_x como en la parte (a), después minimice E con respecto a Δx o Δp_x en la parte (b). Observe que clásicamente, la energía mínima sería cero.

26. Un constructor de cinescopios para T.V. intenta mejorar la resolución de la imagen y al mismo tiempo mantener bajos los costos, diseñando un cañón electrónico que produce un haz electrónico que forma el punto más pequeño posible en la pantalla del tubo y utilizando solamente un cátodo emisor de electrones seguido por un sistema de aperturas bien espaciadas. (a) Demuestre que existe un diámetro óptimo para la segunda apertura. (b) Utilizando parámetros razonables de cinescopios de T.V., estime el tamaño mínimo del punto.

27. Un niño sobre una escalera de altura H, deja caer canicas de masa m al piso, tratando de pegarle a una fisura en el piso. Para apuntar, utiliza equipo de la más alta precisión. (a) Demuestre que las canicas no caerán en la fisura por una distancia del orden de $(\hbar/m)^{1/2}(H/g)^{1/4}$, donde g es la aceleración debida a la gravedad. (b) Utilizando parámetros razonables de H y m, evaluar esta distancia.

28. Demuestre que con el fin de poder determinar por cuál rendija, de un sistema de doble rendija, pasa un fotón sin destruir el patrón de difracción de rendija doble, debe satisfacerse que $\Delta y \Delta p_y \ll \hbar/2$ Como esta condición viola el principio de incertidumbre, no puede cumplirse.

4

Modelo atómico de Bohr

4.1 Modelo de Thomson 115

Propiedades del modelo; partículas α; dispersión múltiple; experimento de Geiger-Marsden; falla del modelo.

4.2 Modelo de Rutherford 119

Núcleos; trayectoria de las partículas α-; parámetro de impacto y distancia de máximo acercamiento; cálculo de Rutherford; comparación con el experimento de Geiger-Marsden; radios nucleares; definición de sección transversal diferencial; ángulo sólido; sección transversal de dispersión de Rutherford.

4.3 La estabilidad del átomo nuclear 126

Radiación por un cuerpo rígido clásico acelerado.

4.4 Espectros atómicos 126

Líneas espectrales; serie del hidrógeno; fórmula de Balmer; constante de Rydberg; serie de los alcalinos; espectros de absorción.

4.5 Postulados de Bohr 129

Enunciados de los postulados; cuantización del impulso angular orbital; estimación.

4.6 Modelo de Bohr 130

Cálculo de Bohr; radios de las órbitas; cuantización de la energía en el átomo monoelectrónico; comparación con la fórmula de Balmer; helio simplemente ionizado.

4.7 Corrección por masa nuclear finita 136

Masa reducida; evaluación de la constante de Rydberg; positronio; deuterio; átomo muónico.

4.8 Estados de energía atómicos 139

Experimento de Frank-Hertz; energía de ionización; estados del continuo.

4.9 Interpretación de las reglas de cuantización 142

Reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld; espacio fase y diagramas de fase; oscilador armónico simple; átomo monoelectrónico e interpretación de de Broglie; partícula en una caja unidimensional.

4.10 Modelo de Sommerfeld 146

Cuantización de las órbitas elípticas; números cuánticos principal y azimutal; degeneración; efecto de la relatividad; estructura fina del hidrógeno; constante de estructura fina; reglas de selección.

4.11 El principio de correspondencia 149

Enunciado del principio; justificación; oscilador armónico simple cargado; átomo de hidrógeno.

4.12 Una crítica a la teoría cuántica antigua 151

Recapitulación; fallas de la teoría cuántica antigua; en busca de un substituto.

Preguntas 152

Problemas 153

4

Modelo atómico de Bohr

4.1 Modelo de Thomson

Hacia el año 1910 existía mucha evidencia experimental de que los átomos contienen electrones (por ejemplo, dispersión de Rayos X por átomos, efecto fotoeléctrico, etc.). Esos experimentos proporcionan una estimación de Z, que es el número de electrones en un átomo y que aproximadamente es igual a $A/2$ donde A es el peso atómico químico del átomo que se trate. Puesto que normalmente los átomos son neutros, deberán contener carga positiva igual en magnitud a la carga negativa que proporcionan sus electrones. De esta manera, un átomo neutro tiene una carga negativa $-Ze$, donde $-e$ es la carga del electrón, y una carga positiva de la misma magnitud. El que la masa de un electrón sea muy pequeña, aún comparada con la masa del átomo más ligero, implica que la mayor parte de la masa del átomo deberá estar asociada con la carga positiva.

Naturalmente que estas consideraciones conducen al problema de la distribución, dentro del átomo, de las cargas positivas y negativas. J. J. Thomson propuso una descripción tentativa o *modelo* de un átomo según el cual los electrones cargados negativamente estaban localizados dentro de una distribución continua de carga positiva. Se suponía que la distribución de carga positiva era de forma esférica con un radio cuyo orden de magnitud era de 10^{-10} m que era el radio conocido para un átomo. (Valor que se puede obtener de la densidad de un sólido típico, su peso atómico y el número de Avogrado). Debido a su repulsión mutua, los electrones se deberían distribuir uniformemente en la esfera de carga positiva. La figura 4-1 ilustra este modelo del átomo llamado "pastel de pasas". En un átomo en su estado de energía posible más bajo, los electrones deberían estar fijos en sus posiciones de equilibrio. En átomos excitados (por ejemplo, átomos en materiales a altas temperaturas), los electrones deberían vibrar alrededor de sus posiciones de equilibrio. Ya que la teoría electromagnética clásica predice que un cuerpo cargado acelerado, tal como un electrón vibrando, emite radiación electromagnética, era posible entender cualitativamente la emisión de dicha radiación por átomos excitados sobre la base del modelo de Thomson. Sin embargo, existía desacuerdo con los espectros observados experimentalmente.

Ejemplo 4-1. (a) Supóngase que existe un electrón de carga $-e$ en el interior de una región esférica con densidad de carga positiva uniforme ρ (un átomo de hidrógeno de Thomson). Demostrar que, de tener energía cinética, su movimiento será el de un oscilador armónico simple cuyo punto de equilibrio es el centro de la esfera.

Sea a la distancia a la que el electrón se desplaza de la posición de equilibrio donde a es menor que el radio de la esfera. Se conoce que mediante la ley de Gauss es posible calcular la fuerza sobre la carga si se utiliza la ley de Coulomb.

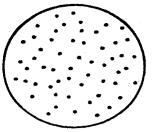


FIGURA 4-1
Modelo de Thomson del átomo-esfera de carga positiva con electrones incrustados.

$$F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{4}{3}\pi a^3\rho\right)\frac{e}{a^2} = -\frac{\rho e a}{3\epsilon_0}$$

donde $(4/3)\pi a^3\rho$ es la carga positiva neta en una esfera de radio a. Por lo tanto se puede escribir $F = -ka$ donde la constante $k = \rho e/3\epsilon_0$. Si se libera al electrón en el punto a sin velocidad inicial, esta fuerza producirá un movimiento armónico simple a lo largo de un diámetro de la esfera, ya que siempre está dirigida hacia el centro y tiene una intensidad que es proporcional al desplazamiento desde el centro.

(b) Considérese que la carga total positiva tiene la magnitud de una carga electrónica (de modo que el átomo no tiene carga neta) y que se encuentra distribuida sobre una esfera de radio $r' = 1.0 \times 10^{-10}$ m.

Determinar la constante k de la fuerza y la frecuencia del movimiento del electrón

Se tiene

$$\rho = \frac{e}{\frac{4}{3}\pi r'^3}$$

de modo que

$$k = \frac{\rho e}{3\epsilon_0} = \frac{e}{\frac{4}{3}\pi r'^3}\frac{e}{3\epsilon_0} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r'^3}$$

$$= \frac{9.0 \times 10^9 \text{ nt-m}^2/\text{coul}^2 \times (1.6 \times 10^{-19} \text{ coul})^2}{(1.0 \times 10^{-10} \text{ m})^3} = 2.3 \times 10^2 \text{ nt/m}$$

Entonces, la frecuencia del movimiento armónico simple es

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2.3 \times 10^2 \text{ nt/m}}{9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}}} = 2.5 \times 10^{15} \text{ seg}^{-1}$$

Dado que la radiación emitida por el átomo (en analogía con la radiación emitida por los electrones que oscilan en una antena) tendrá esta misma frecuencia, que corresponderá a la longitud de onda

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3.0 \times 10^8 \text{ m/seg}}{2.5 \times 10^{15}/\text{seg}} = 1.2 \times 10^{-7} \text{ m} = 1200 \text{ Å}$$

que se encuentra en la región del espectro electromagnético correspondiente al violeta lejano. Es fácil demostrar que un electrón que se mueve en una órbita circular estable cuyo radio es menor que el radio del átomo de Thomson, revoluciona a la misma frecuencia y por lo tanto, también radiará a la misma frecuencia.

Por supuesto que la suposición de un radio diferente de la esfera de carga positiva daría una frecuencia diferente. Pero el hecho de que un átomo de hidrógeno de Thomson tenga solamente una frecuencia de emisión característica está en contraposición con el gran número de frecuencias diferentes que se observan en el espectro del hidrógeno. ◀

En el año de 1911 Ernest Rutherford, anteriormente estudiante de Thomson, obtuvo del análisis de partículas α dispersadas por átomos pruebas definitivas de lo inadecuado del modelo de Thomson. El análisis de Rutherford demostró que la carga positiva no estaba distribuida en todo el átomo sino concentrada en una región muy pequeña: el núcleo del átomo. Este fue uno

de los desarrollos más importantes en la física atómica y fue el fundamento del material de estudio de la física nuclear.

Para entonces, **Rutherford ya había sido galardonado** con el premio Nobel de 1908 por "sus investigaciones concernientes al decaimiento de los elementos y. . . la química de las substancias radiactivas". Fue un físico muy trabajador con gran talento, enorme iniciativa y confianza en sí mismo. En una carta escrita con posterioridad siendo ya Lord Rutherford, escribió: "Recientemente he leído algunos de mis primeros artículos y, Ud. sabe, cuando terminé me dije, Rutherford, mi muchacho, **tú** eras un tipo sumamente listo". Aunque complacido por haber ganado un premio Nobel, prefería el que hubiera sido en física y no en química. (En aquel entonces cualquier investigación sobre los elementos se consideraba en el terreno de la química). En su discurso en el que aceptó el premio, mencionó que durante su trabajo con radiactividad, había observado muchas transformaciones, pero nunca había visto una tan rápida como la suya propia, de físico a químico.

Rutherford supo que las partículas alfa eran átomos de helio doblemente ionizados (es decir, átomos de He sin dos electrones), que eran emitidos espontáneamente y a gran velocidad por varios materiales radiactivos. En la figura 4-2 se muestra un arreglo experimental utilizado por él y sus colegas para estudiar la dispersión de partículas alfa al pasar a través de láminas delgadas de varias substancias. La fuente radiactiva emite partículas alfa que son colimadas mediante un par de diafragmas en un fino haz paralelo, el cual incide sobre una hoja de alguna substancia usualmente metálica. La lámina es tan delgada que las partículas pasan completamente a su través perdiendo muy poco de su velocidad. Sin embargo, al atravesar la lámina cada una de las partículas α experimenta muchas deflexiones pequeñas debido a la fuerza de Coulomb que actúa debido a su carga y las cargas positivas y negativas de los átomos de la lámina. Puesto que la deflexión de una partícula alfa al pasar a través de un solo átomo depende de los detalles de su trayectoria a través de éste, la deflexión total al pasar a través de la laminilla completa será diferente para las diferentes partículas alfa en el haz. En consecuencia el haz emergerá de la hoja como un haz divergente y no como un haz paralelo. Midiendo el número de partículas α dispersadas en cada intervalo angular entre Θ y $\Theta + d\Theta$ es posible obtener una medida cuantitativa de su divergencia. El detector de partículas alfa consiste de un microscopio y una película del compuesto *ZnS* cristalino. El cristal de *ZnS* tiene la propiedad de producir un pequeño destello luminoso al ser golpeado por una partícula α y al observar con el microscopio es posible distinguir el destello proveniente de la incidencia de *una* partícula α . En el experimento un observador cuenta el número de destellos luminosos producidos por unidad de tiempo como función de la posición angular del detector.

Si se denota con $\mathcal{N}$ al número de átomos que deflectan a una partícula α en su paso a través de la hoja, con θ el ángulo de deflexión al pasar a través de un átomo (véase figura 4-3) y con Θ la

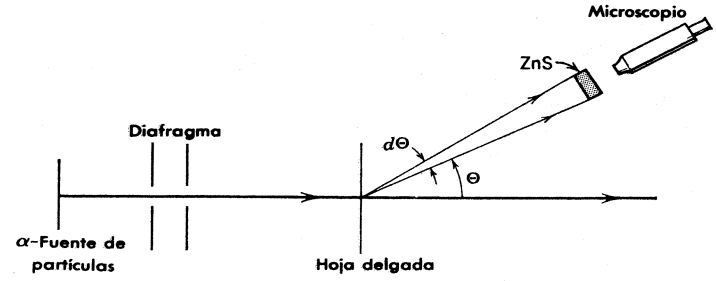


FIGURA 4-2

Arreglo para un experimento de dispersión de partículas α. La región por la que viajan las partículas α se encuentra al vacío.

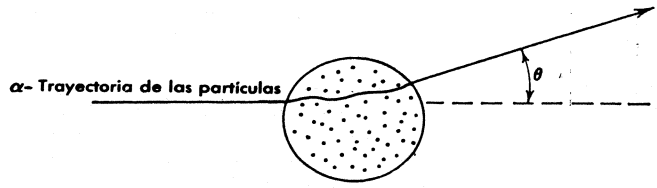


FIGURA 4-3

Una partícula α pasando a través de un átomo según el modelo de Thomson. El ángulo θ especifica la deflexión de la partícula.

deflexión total al pasar a través de todos los átomos en su trayectoria por el interior de la hoja, se puede demostrar mediante la teoría estadística que

$$(\overline{\Theta^2})^{1/2} = \sqrt{\mathcal{N}}(\overline{\theta^2})^{1/2} \tag{4-1}$$

Aquí $(\overline{\Theta^2})^{1/2}$ es la raíz media cuadrática de la deflexión total o del ángulo de dispersión y $(\overline{\theta^2})^{1/2}$ es la raíz media cuadrática del ángulo de dispersión en una deflexión por un solo átomo. El factor $\sqrt{\mathcal{N}}$ proviene de la aleatoriedad de la deflexión; si todas las deflexiones fueran en la misma dirección, se debería obtener $\mathcal{N}$ en lugar de $\sqrt{\mathcal{N}}$. De manera más general, la teoría estadística predice para las partículas α dispersadas la distribución angular siguiente

$$N(\Theta)\, d\Theta = \frac{2I\Theta}{\overline{\Theta^2}}\, e^{-\Theta^2/\overline{\Theta^2}}\, d\Theta \tag{4-2}$$

donde $N(\Theta)\, d\Theta$ es el número de partículas α dispersadas dentro del intervalo angular de Θ a $\Theta + d\Theta$, e I es el número de α que pasan por la hoja.

Debido a que los electrones tienen una masa muy pequeña comparada con la de la partícula α son capaces de producir solamente una deflexión muy pequeña a éstas. El átomo de Thomson no es capaz de proporcionar una repulsión debido a la fuerza de Coulomb lo suficientemente intensa para producir una deflexión considerable de las partículas α ya que la carga positiva está distribuida sobre todo el volumen del átomo de radio $r' \simeq 10^{-10}$m. En efecto, usando el modelo de Thomson se encuentra que la deflexión causada por un átomo es $\theta < 10^{-4}$ rad. Este resultado, (4-1) y (4-2) constituyen las predicciones que sobre la dispersión de partículas α hace el modelo de Thomson, mismas que fueron comprobadas por Rutherford y su grupo.

Ejemplo 4-2. (a) En un experimento típico (Geiger y Marsden, 1909) las partículas α eran dispersadas por una laminilla de oro de 10^{-6}m de espesor. Se encontró que el promedio del ángulo de dispersión era $(\overline{\Theta^2})^{1/2} \simeq 1° \simeq 2 \times 10^{-2}$ rad. Calcular $(\overline{\theta^2})^{1/2}$.

El número de átomos atravesados por la partícula α es aproximadamente igual al espesor de la laminilla dividido entre el diámetro del átomo. Así

$$\mathcal{N} \simeq 10^{-6}\ \text{m}/10^{-10}\ \text{m} = 10^4$$

De (4-1) se obtiene que el ángulo de deflexión promedio al atravesar un solo átomo, es

$$(\overline{\theta^2})^{1/2} = \frac{(\overline{\Theta^2})^{1/2}}{\sqrt{\mathcal{N}}} \simeq \frac{2 \times 10^{-2}}{10^2} \simeq 2 \times 10^{-4}\ \text{rad}$$

que concuerda con la estimación hecha mediante el modelo de Thomson $\theta < 10^{-4}$ rad.

(b) Más del 99% de las partículas α fueron dispersadas a ángulos menores de 3°. Las mediciones en las que se utilizaron 1° para $(\bar{\Theta}^2)^{1/2}$, concordaron con (4-2) para $N(\Theta)d\Theta$ para ángulos Θ en este intervalo, pero la distribución angular para las pocas partículas dispersadas a ángulos mayores estaban en flagrante desacuerdo con (4-2). Por ejemplo, se encontró que la fracción de α dispersadas a ángulos mayores de 90°, $N(\Theta > 90°)/I$, fue alrededor de 10^{-4}. ¿Qué es lo que predice (4-2)?

Se tiene

$$\frac{N(\Theta > 90°)}{I} = \frac{\int_{90°}^{180°} N(\Theta)\, d\Theta}{I} = e^{-(90)^2} = 10^{-3500}$$

un resultado totalmente diferente del valor experimental de 10^{-4}.

En general se observó que el número de partículas α dispersadas era *mucho* mayor que el número predicho para todos los ángulos de dispersión mayores a unos cuantos grados. ◀

La existencia de una probabilidad pequeña pero diferente de cero para la dispersión a ángulos grandes, no podía explicarse en términos del modelo de Thomson, el cual básicamente incluía ángulos de dispersión *pequeños* provenientes de *muchos* átomos. Para los científicos acostumbrados a pensar en términos de este modelo resultó una gran sorpresa que algunas partículas α **resultaran deflectadas a ángulos muy grandes, cercanos a 180°. En palabras de Rutherford: "fué** el evento más increible que me haya pasado en mi vida. Fue tan increible como el que usted lanzara una bala de 15 pulgadas a un papel sanitario y ésta regresara y lo golpeara".

En los experimentos en los que se utilizaban hojas de varios espesores se demostró que el número de dispersiones a ángulos grandes era proporcional a $\mathcal{N}$, al número de átomos atravesados por la partícula α. Esta es justamente la dependencia que se obtendría si existiera una probabilidad pequeña para que una partícula α fuera dispersada a través de un ángulo *grande* al atravesar un *solo* átomo. Esto no podía suceder en el modelo de Thomson y fue lo que condujo a Rutherford en 1911 a proponer un nuevo modelo.

4.2 Modelo de Rutherford

En el modelo de Rutherford de la estructura del átomo, se supone que toda la carga positiva del átomo, y en consecuencia esencialmente toda su masa, se encuentra concentrada en una región del espacio pequeña localizada en el centro y denominada *núcleo*. Si las dimensiones del núcleo son suficientemente pequeñas, una partícula α que pase muy cerca de él puede ser dispersada a un ángulo grande al atravesar un *solo* átomo gracias a una repulsión debida a su carga que es muy intensa. Sí, en vez de utilizar $r' = 10^{-10}$ m para el radio de la distribución de carga positiva del modelo de Thomson, que conduce a un ángulo de deflexión máximo $\theta \simeq 10^{-4}$ rad, nos preguntamos cuál debería ser el radio r' de un núcleo para obtener, por ejemplo $\theta \simeq 1$ rad, se encontrará $r' = 10^{-14}$ m y esto, como se verá, resultará ser una buena estimación del radio del núcleo atómico.

Rutherford hizo un cálculo detallado de la distribución angular que se esperaría para la dispersión de partículas α por átomos del tipo de los propuestos en su modelo; estos cálculos únicamente comprendían la dispersión a ángulos mayores de unos cuantos grados; por lo tanto era posible ignorar las dispersiones debidas a electrones atómicos. Entonces, la dispersión se debe a la fuerza de Coulomb repulsiva que actúa entre la partícula α cargada positivamente y el núcleo con carga del mismo signo. Además, en los cálculos solamente se consideraban dispersiones provocadas por átomos pesados con objeto de permitir la suposición de que la masa del núcleo es tan grande comparada con la de la partícula α que aquel no retrocede en forma apreciable (permanece fijo en el espacio) durante el proceso de dispersión. También se supuso que la partícula α no penetraba en la región nuclear, de manera que tanto la partícula como el núcleo (ambas supuestamente esféricas) se comportaban, desde el enfoque de la fuerza de

Coulomb, como cargas puntuales. Como se verá posteriormente estas suposiciones son perfectamente válidas excepto para la dispersión de partículas α por átomos ligeros y en tales casos será posible corregir mediante un valor finito para la masa nuclear. Finalmente, en estos cálculos se utiliza la mecánica no-relativista, ya que $v/c \simeq 1/20$.

La figura 4-4 muestra la dispersión de una partícula α de carga $+ze$ y masa M, al pasar en la proximidad de un núcleo de carga $+Ze$. El núcleo está fijo en el origen del sistema de coordenadas. Cuando la partícula se encuentra muy lejos del núcleo la fuerza de Coulomb que actúa sobre ella es muy pequeña, de manera que la partícula se aproxima al núcleo a lo largo de una línea recta con rapidez constante v. Después de la dispersión, la partícula se moverá, a partir de cierta distancia desde el núcleo, a lo largo de una línea recta y con rapidez constante v'. La posición de la partícula con relación al núcleo queda especificada por la coordenada radial r y el ángulo polar φ, medido a partir de un eje paralelo a la trayectoria inicial. La distancia perpendicular de este eje a la línea correspondiente al movimiento inicial se conoce con el nombre de *parámetro de impacto* y se denota por b. El ángulo de dispersión θ es justamente el ángulo entre el eje y una línea trazada desde el origen y paralela a la línea del movimiento final; b' es la distancia perpendicular entre estas dos líneas.

Ejemplo 4-3. Demostrar que $v = v'$ y $b = b'$.

Por ser una fuerza de Coulomb, la fuerza que actúa sobre la partícula siempre se encuentra en la dirección radial y por lo tanto el impulso angular de la partícula alrededor del origen tiene un valor constante L. Entonces el impulso angular inicial es igual al impulso angular final, es decir

$$Mvb = Mv'b' = L$$

Por supuesto que la energía cinética de la partícula no se mantiene constante durante la dispersión, pero la energía cinética inicial deberá ser igual a la energía cinética final ya que se ha supuesto que el núcleo permanece en reposo. Entonces

$$\frac{1}{2}Mv^2 = \frac{1}{2}Mv'^2$$

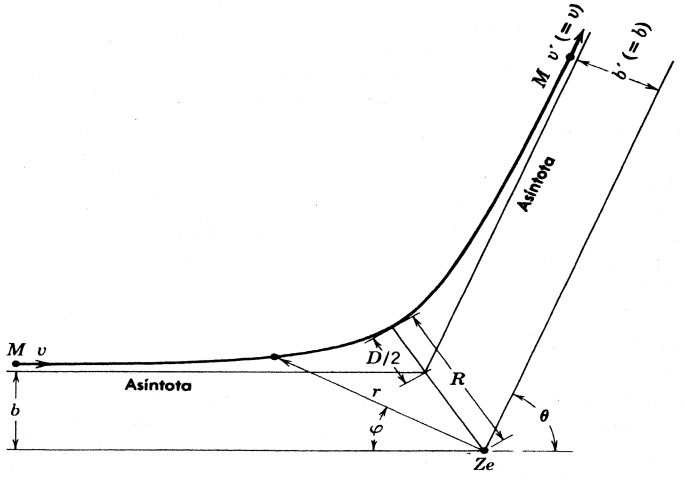


FIGURA 4-4

Trayectoria hiperbólica seguida en el modelo de Rutherford, mostrando las coordenadas r, φ y los parámetros b, D. Estos dos parámetros determinan completamente la trayectoria, en particular el ángulo de dispersión θ y la distancia de máximo acercamiento R. La carga puntual nuclear Ze en un foco de la rama de la hipérbola.

Por lo que, $v = v'$ y de la relación anterior $b = b'$, tal como se dibujó en la figura 4-4. ◀

Mediante un cálculo directo según la mecánica clásica y utilizando la fuerza de Coulomb repulsiva $(1/4\pi\epsilon_0)(zZe^2/r^2)$, se obtiene la ecuación para la trayectoria de la partícula α (véase el apéndice D)

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b}\operatorname{sen}\varphi + \frac{D}{2b^2}(\cos\varphi - 1) \tag{4-3}$$

que es la ecuación de una hipérbola en coordenadas polares. Donde D es una constante definida por

$$D \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{zZe^2}{Mv^2/2} \tag{4-4}$$

que resulta ser un parámetro conveniente y numéricamente igual a la *distancia de máximo acercamiento* al núcleo en una colisión frontal ($b = 0$). Esto se obtiene de considerar que a esta distancia la energía potencial $(1/4\pi\epsilon_0)(zZe^2/D)$ es igual a la energía cinética inicial $Mv^2/2$ igualando y resolviendo para D. En este punto la partícula se detendrá e invertirá la dirección de su movimiento. El ángulo de dispersión θ se determina de (4-3) evaluando el valor de φ cuando $r \to \infty$ y haciendo $\theta = \pi - \varphi$. Así se obtiene

$$\cot\frac{\theta}{2} = \frac{2b}{D} \tag{4-5}$$

Ejemplo 4-4. Evaluar R que es la distancia de máximo acercamiento de la partícula al centro del núcleo (el origen en la figura 4-4).

La coordenada radial r será igual a R cuando el ángulo polar sea $\varphi = (\pi - \theta)/2$. Evaluando (4-3) para este ángulo se obtiene

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{b}\operatorname{sen}\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) + \frac{D}{2b^2}\left[\cos\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) - 1\right]$$

Y de (4-5) se tiene

$$b = \frac{D}{2}\cot\frac{\theta}{2} = \frac{D}{2}\tan\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right)$$

lo cual, después de algunas simplificaciones conduce a

$$R = \frac{D}{2}\left[1 + \frac{1}{\cos\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right)}\right]$$

o

$$R = \frac{D}{2}\left[1 + \frac{1}{\operatorname{sen}(\theta/2)}\right] \tag{4-6}$$

Resultado que se puede checar físicamente. Obsérvese que cuando $\theta \to \pi$, lo que corresponde a $b = 0$, es decir una colisión frontal, $R \to D$, la distancia de máximo acercamiento. Además y como era de esperarse, $\theta \to 0$, corresponde a una deflexión nula y por lo tanto b y R tienden a infinito. ◀

En la figura (4-5) se puede observar que para el caso de la dispersión de una partícula α por un solo núcleo, si el parámetro de impacto está en el intervalo entre b y $b + db$, el ángulo de

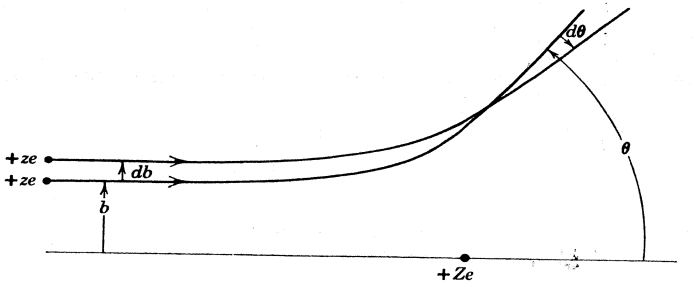


FIGURA 4-5

Relación entre el parámetro de impacto b y el ángulo de dispersión θ. Al aumentar b (alejarse del núcleo) el ángulo θ decrece (menor ángulo de dispersión). Las partículas α con parámetro de impacto entre b y $b + db$ son dispersadas en el intervalo angular entre θ y $\theta + d\theta$.

dispersión está en el intervalo entre θ y $\theta + d\theta$, donde la relación entre b y θ está dada por la ecuación (4-5). El problema de calcular el número $N(\Theta)\, d\Theta$ de partículas α dispersadas en el intervalo angular Θ y $\Theta + d\Theta$ al atravesar la laminilla completa es equivalente al problema de calcular el número de partículas que inciden con un parámetro de impacto entre b y $b + db$. **Como se mostrará en el ejemplo siguiente, el resultado es**

$$N(\Theta)\, d\Theta = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2}\right)^2 \frac{I\rho t 2\pi \operatorname{sen}\Theta\, d\Theta}{\operatorname{sen}^4(\Theta/2)} \tag{4-7}$$

donde I es el número de partículas α que inciden sobre una laminilla de espesor t cm y que contiene ρ núcleos por centímetro cúbico.

Ejemplo 4-5. Verifíquese la ecuación (4-7).

Considérese, como se muestra en la figura 4-6, un segmento de la **laminilla** con área de sección transversal de 1 cm². Alrededor de un eje que pasa por cada núcleo se traza un anillo con radio interno b y **radio externo $b + db$, siendo el área de cada uno de los anillos $2\pi b\, db$. El número de estos anillos en este**

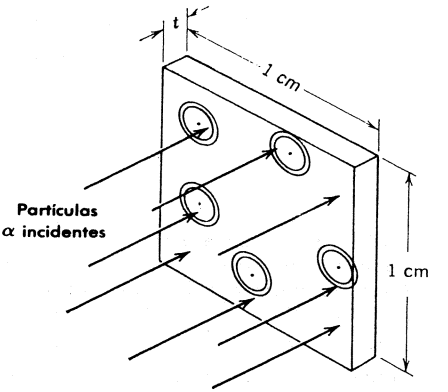


FIGURA 4-6

Haz de partículas α que inciden sobre una laminilla de 1 cm² de área y espesor t cm. Los anillos que son simplemente construcciones geométricas y sin significado físico, están centrados en los núcleos. En realidad, existen muchos más anillos de los mostrados y son más pequeños.

segmento de la hoja es ρt. La probabilidad de que una partícula α pase a través de uno de estos anillos, $P(b)\,db$, es igual al área total cubierta por los anillos dividida entre el área total del segmento. Se supone que la laminilla es lo suficientemente delgada como para ignorar el traslapamiento de los anillos correspondientes a núcleos diferentes. El proceso involucra *dispersión simple* y la probabilidad de dispersión por más de un núcleo se considera muy pequeña. Por lo tanto

$$P(b)\,db = \rho t 2\pi b\,db$$

pero $b = (D/2)\cot(\theta/2)$ así que

$$db = -\frac{D}{2}\frac{d\theta/2}{\text{sen}^2(\theta/2)}$$

y

$$b\,db = -\frac{D^2}{8}\frac{\cos(\theta/2)\,d\theta}{\text{sen}^3(\theta/2)} = -\frac{D^2}{16}\frac{\text{sen}\,\theta\,d\theta}{\text{sen}^4(\theta/2)}$$

Entonces

$$P(b)\,db = -\frac{\pi}{8}\rho t D^2\,\text{sen}\theta\frac{d\theta}{\text{sen}^4(\theta/2)}$$

Pero $-P(b)\,db$ es igual a la probabilidad de que las partículas incidentes sean dispersadas en un intervalo angular entre θ y $\theta + d\theta$. El signo menos proviene del hecho de que un decremento en b, es decir, $-db$, corresponde a un incremento en θ es decir, $+d\theta$. Utilizando la notación anterior, Θ para el ángulo de dispersión al pasar a través de la laminilla completa.

$$\frac{N(\Theta)\,d\Theta}{I} = -P(b)\,db = \frac{\pi}{8}\rho t D^2\frac{\text{sen}\,\Theta\,d\Theta}{\text{sen}^4(\Theta/2)}$$

Por último, con $D = (1/4\pi\epsilon_0)zZe^2/(Mv^2/2)$, se obtiene (4-7). ◀

Si se comparan los resultados (4-7) del modelo de Rutherford con los del modelo de Thomson (4-2) se observa que no obstante que en ambos el factor angular decrece rápidamente al crecer el ángulo, el decremento es bastante más lento para las predicciones de Rutherford. Las dispersiones a ángulos grandes son mucho más probables en una dispersión simple por un átomo con núcleo que en dispersiones múltiples a ángulos pequeños por un átomo de "pastel de pasas". A los pocos meses de la derivación de la ecuación (4-7). Geiger y Marsden llevaron a cabo experimentos detallados con objeto de probarla; los resultados que obtuvieron fueron:

1. Se comprobó la dependencia angular, utilizando laminillas de Ag y Au, en el intervalo de 5° a 150°. No obstante que $N(\Theta)d\Theta$ varía en este intervalo por un factor de aproximadamente 10^5, los datos experimentales se mantienen, proporcionales a la distribución angular teórica dentro de un porcentaje pequeño.

2. Se encontró que la cantidad $N(\Theta)d\Theta$ era efectivamente proporcional al espesor t de la hoja para un intervalo de aproximadamente 10 pulgadas de espesor para todos los elementos investigados.

3. La ecuación (4-7) predice que el número de partículas α dispersadas será inversamente proporcional al cuadrado de su energía cinética, $Mv^2/2$. Esto se comprobó utilizando partículas α provenientes de distintas fuentes radiactivas y la dependencia con la energía cinética predicha se confirmó experimentalmente con una variación en la energía disponible de alrededor de un factor de 3.

4. Por último, la ecuación predice que $N(\Theta)d\Theta$ es proporcional a $(Ze)^2$, el cuadrado de la carga nuclear. En aquel entonces Z no era conocida para varios átomos. Suponiendo válida la ecuación (4-7), los experimentos se utilizaron para determinar Z y se encontró que ésta era igual al número atómico de los átomos blanco. Esto implicaba que el primer átomo en la tabla

periódica, H, contenía un electrón; el segundo, He, contenía dos electrones; el tercero, Li, contenía tres etc, ya que Z también es el número de los electrones en el átomo neutro. Este resultado fue comprobado de manera independiente por técnicas de rayos X y que se analizarán en el capítulo 9.

Una vez comprobado su modelo, Rutherford fue capaz de poner límites al tamaño del núcleo. La distancia de máximo acercamiento D es el menor valor que puede tomar R y que ocurre para $\Theta = 180°$. Entonces

$$R_{180°} = D = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{zZe^2}{Mv^2/2}$$

El radio del núcleo no puede ser mayor que D debido a que los resultados están basados en la suposición de que la fuerza que actúa sobre la partícula α siempre es estrictamente una fuerza de Coulomb entre dos cargas puntuales. Suposición que no sería cierta si la partícula penetrara a la región nuclear en su distancia de máximo acercamiento. La ecuación anterior demuestra que $R_{180°}$ decrece conforme Z decrece y surge la pregunta: ¿Qué tanto puede decrecer $R_{180°}$ antes de que sea menor que el radio del núcleo? Para núcleos muy ligeros se observaron discrepancias con las dispersiones predichas por Rutherford. Parte de ellas debidas a la violación que existe para núcleos muy ligeros a la suposición de que la masa nuclear es grande comparada con la masa de la partícula α; sin embargo, aún tomando en cuenta el valor finito de la masa nuclear subsisten las discrepancias. Lo cual sugiere que la penetración del núcleo ocurre en estos casos alterando las dispersiones predichas. Por lo tanto, el radio nuclear se puede definir como el valor de R para el ángulo de dispersión límite, o la energía límite incidente, para el cual aparece la discrepancia con la teoría de Rutherford. Por ejemplo, en la figura (4-7) se muestran los datos obtenidos por el grupo de Rutherford para la dispersión de partículas α de distintas energías y para un ángulo grande y fijo cuando la laminilla blanco era Al. La ordenada es la relación del número de partículas dispersadas observado, al número predicho por la teoría de Rutherford (corregido por la masa nuclear finita). La abscisa es la distancia de máximo acercamiento calculada a partir de (4-6). Estos datos implican que el radio del núcleo de Al es alrededor de 10^{-14}m $= 10$ F. (La unidad de distancia utilizada en física nuclear es el *Fermi*, que es igual a 10^{-15} m. Nótese que un F $= 10^{-5}$ Å, donde Å , el angstrom es la unidad utilizada en física atómica).

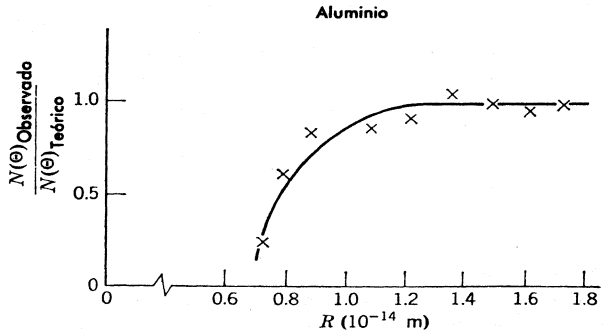


FIGURA 4-7

Algunos de los datos obtenidos en la dispersión por aluminio de partículas α provenientes de una fuente radiactiva. La abscisa es la distancia de máximo acercamiento al núcleo central.

La fórmula de dispersión de Rutherford (4-7) por lo general se expresa en términos de una *sección transversal diferencial* $d\sigma/d\Omega$. Esta cantidad se define de manera que el número dN de partículas dispersadas dentro de un ángulo sólido $d\Omega$ al ángulo de dispersión Θ es

$$dN = \frac{d\sigma}{d\Omega} In\, d\Omega \tag{4-8}$$

si I partículas α inciden sobre una hoja blanco que contiene n núcleos por cm^2. La definición es análoga a la definición de sección transversal σ en (2-18)

$$N = \sigma In$$

Esto se ilustra en la figura 4-8. El *ángulo sólido* $d\Omega$, que esencialmente es un intervalo angular bidimensional, se mide numéricamente por el área cubierta por el intervalo angular sobre una esfera de radio unidad con centro en el lugar en el que ocurre la dispersión. Para la dispersión de Rutherford que es simétrica alrededor del eje del haz incidente, es importante el ángulo sólido $d\Omega$ que corresponde a todos los eventos en los cuales el ángulo de dispersión se encuentra en el intervalo $d\Theta$ a Θ. Como se muestra en la figura

$$d\Omega = 2\pi \operatorname{sen}\Theta\, d\Theta$$

Utilizando esta expresión en (4-7), escribiendo $N(\Theta)\,d\Theta$ como dN y escribiendo el término ρt como n, se obtiene

$$dN = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2}\right)^2 \frac{1}{\operatorname{sen}^4(\Theta/2)} In\, d\Omega$$

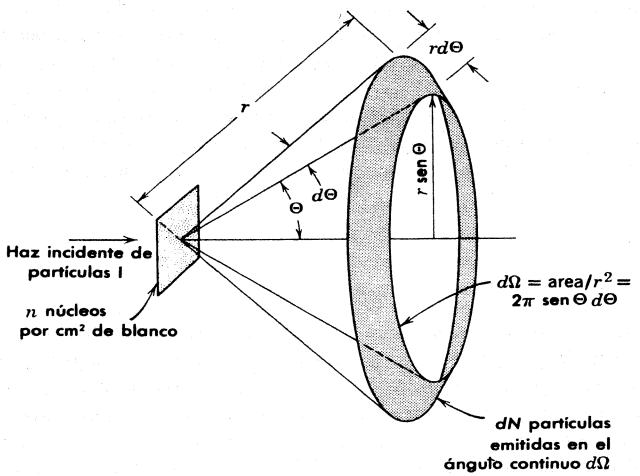


FIGURA 4-8

Ilustración de la definición de sección transversal diferencial $d\sigma/d\Omega$. Si el blanco es lo suficientemente delgado como para que una partícula incidente tenga una oportunidad despreciable de interaccionar en más de un núcleo mientras atraviesa el blanco, se tiene $dN = (d\sigma/d\Omega)In\, d\Omega$.

Comparando con la definición de (4-8) se demuestra que la *sección transversal diferencial de dispersión de Rutherford* es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2}\right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4\,(\Theta/2)} \tag{4-9}$$

4.3 La estabilidad del átomo nuclear

La verificación experimental detallada de las predicciones del modelo del átomo nuclear de Rutherford dio lugar a ciertas dudas en lo concerniente a la validez del modelo. En el centro del átomo se encuentra un núcleo cuya masa es aproximadamente la del átomo completo y cuya carga es igual al número atómico Z multiplicado por e; alrededor de este núcleo existen Z electrones que hacen que el átomo sea neutro. Pero surgen ciertas preguntas acerca de la *estabilidad* del átomo. Por ejemplo, si se supone que los electrones están estacionarios, no existe un arreglo estable de esos electrones que prevenga que éstos caigan al núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb. No es posible permitir que el átomo vuelva a caer a lo mismo (regresando al pastel de pasas de tamaño nuclear) debido a que su radio sería del orden de un radio nuclear que es menor en cuatro órdenes de magnitud que el radio que los experimentos han mostrado que tiene el átomo.

Un primer vistazo parece indicar que simplemente deberá permitirse que los electrones circulen alrededor del núcleo en órbitas similares a la de los planetas alrededor del sol. Tal sistema sería mecánicamente estable, como lo es el sistema solar. Sin embargo, surge una seria dificultad al tratar de llevar esta idea del sistema planetario al sistema atómico. El problema es que los electrones cargados estarían constantemente acelerados en su movimiento alrededor del núcleo y, según la teoría electromagnética clásica todo cuerpo cargado acelerado radía energía en forma de radiación electromagnética (véase apéndice B). La energía debería emitirse a expensas de la energía mecánica del electrón y el electrón debería caer en espiral hacia el núcleo. De nuevo se tiene un átomo que vuelve a encajar rápidamente a las dimensiones nucleares (para un átomo de diámetro de 10^{-10} m se puede computar que el tiempo de colapso sería $\simeq 10^{-12}$seg). De esta manera se debería obtener la emisión de un espectro continuo de radiación lo cual no está de acuerdo con el espectro discreto, que sabemos, emiten los átomos.

Este problema de la estabilidad de los átomos conduce a un modelo simple de la estructura atómica. La clave de este exitoso modelo, propuesto en 1913 por Niels Bohr, fue la predicción del espectro de radiación emitido por ciertos átomos. Por lo que resulta apropiado en este momento describir algunos de los rasgos principales de esos espectros.

4.4 Espectros atómicos

En la figura 4-9 se muestra un aparato típico utilizado en la medida de los espectros atómicos. La fuente consiste en una descarga eléctrica que pasa a través de una región que contiene un gas monoatómico. Debido a colisiones con los electrones y con otros átomos, algunos de los átomos en la descarga quedan en un estado en el que su energía total es mayor que la energía de un átomo normal. Al regresar a su estado de energía normal los átomos liberan su exceso de energía mediante la emisión de radiación electromagnética. Esta radiación se colima mediante una rendija y pasa a través de un prisma (o rejilla de difracción para mejor resolución) donde se rompe en su espectro de longitudes de onda para registrarse posteriormente en una placa fotográfica.

La naturaleza del espectro observado se indica sobre la placa fotográfica. En contraste con el espectro continuo de la radiación electromagnética emitida, por ejemplo por la superficie de sólidos a alta temperatura, *la radiación electromagnética emitida por átomos libres se concentra en*

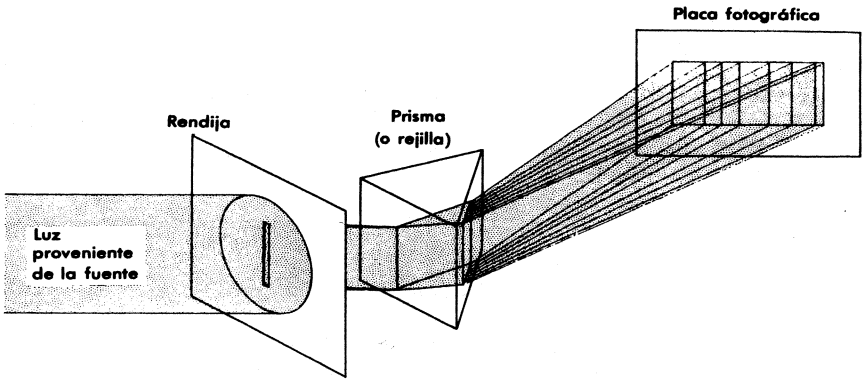


FIGURA 4-9

Representación esquemática de un aparato usado para medir espectros atómicos.

un número de longitudes de onda discretas. A cada una de estas longitudes de onda componente se le denomina una línea debido a que sobre la placa fotográfica cada una de ellas deja una imagen de la rendija. La investigación de los espectros emitidos por diferentes tipos de átomos muestra que cada uno de ellos tiene su propio espectro característico, es decir, las líneas del espectro se encuentran en un conjunto de longitudes de onda característico. Este hecho es de gran importancia práctica debido a que hace de la espectroscopía una técnica muy útil que viene a sumarse a las técnicas usuales del análisis químico. Por esta razón es que se han dedicado muchos esfuerzos para mejorar las medidas de los espectros atómicos y de hecho es necesario mucho esfuerzo debido a que los espectros consisten de muchos cientos de líneas y por lo general son muy complicados.

Sin embargo, el espectro del hidrógeno es relativamente simple, lo cual no es sorprendente ya que éste es el átomo más sencillo debido a que contiene solamente un electrón. La mayor parte del universo consiste de átomos de hidrógeno aislados, de manera que el espectro del hidrógeno es de considerable interés práctico. Como se verá después, existen razones teóricas e históricas para estudiarlo. La figura 4-10 representa la parte del espectro atómico del hidrógeno que cae aproximadamente dentro del intervalo de longitudes de onda visibles. Se ve que el espaciamiento entre líneas adyacentes del espectro, en longitudes de onda, decrece continuamente conforme decrece la longitud de onda de las líneas, de manera que la *serie de líneas* converge a la llamada *límite de la serie* en 3645.6 Å. Las líneas de longitud de onda corta, incluyendo el límite de la serie, son difíciles de observar experimentalmente debido al poco espaciamiento y debido a que se encuentran en el ultravioleta.

La regularidad obvia del espectro de H llevó a muchas gentes a buscar una fórmula empírica que representara la longitud de onda de las líneas. Tal fórmula fue descubierta por Balmer en 1885, y es la ecuación simple

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} \qquad \text{(en unidades Å)}$$

donde $n = 3$ para H_α, $n = 4$ para H_β, $n = 5$ para H_γ, etc., y que es capaz de predecir las longitudes de onda para las primeras nueve líneas de la serie, que eran todas las que se conocían entonces, con una aproximación mayor que una parte en 1000. Este descubrimiento inició una investigación para fórmulas empíricas similares que pudieran aplicarse a series de líneas que en ocasiones son identificables dentro de la distribución complicada de líneas que constituyen los

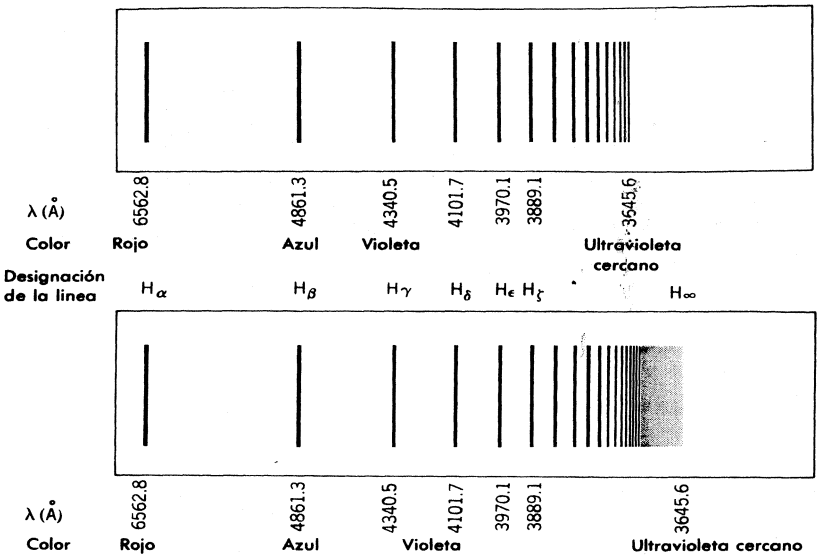


FIGURA 4-10

Arriba: Fotografía de la parte visible del espectro del hidrógeno. *Abajo:* Esquema del mismo espectro con las líneas denotadas.

espectros de otros elementos. La mayor parte de este trabajo fue realizado por Rydberg alrededor de 1890 quien encontró conveniente trabajar con el recíproco de la longitud de onda de las líneas en vez de la longitud de onda misma. En términos del recíproco de la longitud de onda κ la *fórmula de Balmer* se puede escribir como

$$\kappa = 1/\lambda = R_{\text{H}}(1/2^2 - 1/n^2) \qquad n = 3, 4, 5, \ldots \quad (4\text{-}10)$$

donde R_{H} es la llamada *constante de Rydberg* para el hidrógeno. A partir de datos espectroscópicos recientes, se sabe que su valor es

$$R_{\text{H}} = 10967757.6 \pm 1.2 \text{ m}^{-1}$$

Lo cual indica la precisión posible en las mediciones espectroscópicas.

Se han encontrado fórmulas de este tipo para un número de series. Así por ejemplo, se sabe de la existencia de cinco series de líneas en el espectro del hidrógeno y estas se muestran en la tabla 4-1.

Para átomos de elementos alcalinos (Li, Na, K,. . .) las fórmulas para las series son de la misma estructura general. Esto es

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = R\left[\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2}\right] \quad (4\text{-}11)$$

donde R es la constante de Rydberg para el elemento particular, a y b son constantes para la serie particular, m es un entero que es fijo para la serie particular y n es un entero variable. La

constante de Rydberg tiene el mismo valor, dentro de un 0.05%, para todos los elementos aunque muestra un ligero incremento sistemático cuando se incrementa el peso atómico.

Hasta aquí se ha analizado el *espectro de emisión* de un átomo. Una propiedad íntimamente relacionada es el *espectro de absorción*, el cual se puede medir con un aparato similar al mostrado en la figura 4-9 excepto que se utiliza una fuente que emite un espectro continuo y una celda con paredes de vidrio que contiene al gas monoatómico por investigar y que se inserta en algún lugar entre la fuente y el prisma. Después de la exposición y el revelado se encuentra que la placa fotográfica está totalmente obscurecida excepto en cierto número de líneas, las cuales representan un conjunto de longitudes de onda componentes del espectro continuo que incide sobre el prisma que se han perdido y que debieron haber sido absorbidas por los átomos del gas que se encuentra en la celda. Se observa que para cada línea en el espectro de absorción de un elemento existe una línea (de la misma longitud de onda) correspondiente en su espectro de emisión; sin embargo, el inverso no es cierto. Sólo ciertas líneas de emisión se muestran en el espectro de absorción. Normalmente, para el gas hidrógeno sólo aparecen en el espectro de absorción las líneas que corresponden a la serie de Lyman, pero cuando el gas está a alta temperatura, por ejemplo en la superficie de una estrella, las líneas que se encuentran son las correspondientes a la serie de Balmer.

4.5 Postulados de Bohr

Todos estos detalles de los espectros atómicos y muchos más que no se han estudiado deberán de **explicarse mediante un modelo adecuado de la estructura atómica. Además, la gran precisión de** las medidas espectroscópicas imponen requisitos muy severos a la precisión con la cual este modelo debe de ser capaz de predecir cuantitativamente los detalles de los espectros.

En 1913 Niels Bohr desarrolló un modelo que estaba en acuerdo cuantitativo con ciertos datos espectroscópicos (por ejemplo, el espectro del hidrógeno). Este modelo tenía el atractivo adicional de que las matemáticas relativas a este eran muy fáciles de entender. Aunque probablemente el estudiante ya ha visto algo del modelo de Bohr al estudiar sus cursos de física o química elemental, aquí se considerará en detalle con el fin de obtener varios resultados que se necesitarán para hacer comparaciones dentro de este texto y también para revisar los postulados, a veces confusos, sobre los cuales está basado el modelo. Estos postulados son:

1. *Un electrón en un átomo se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb entre el electrón y el núcleo, sujetándose a las leyes de la mecánica clásica.*

TABLA 4-1. La serie del hidrógeno.

Nombres	Intervalos de longitudes de onda	Fórmulas	
Lyman	Ultravioleta	$\kappa = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right)$	$n = 2, 3, 4, \ldots$
Balmer	Ultravioleta cercano y visible	$\kappa = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$	$n = 3, 4, 5, \ldots$
Paschen	Infrarrojo	$\kappa = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right)$	$n = 4, 5, 6, \ldots$
Brackett	Infrarrojo	$\kappa = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right)$	$n = 5, 6, 7, \ldots$
Pfund	Infrarrojo	$\kappa = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right)$	$n = 6, 7, 8, \ldots$

2. *En lugar de una infinidad de órbitas que serían posibles en la mecánica clásica, para un electrón sólo es posible moverse en una órbita para la cual su impulso angular orbital L es un multiplo entero de ħ, la constante de Planck dividida entre 2π.*

3. *A pesar de que el electrón se acelera constantemente cuando se mueve en una de estas órbitas permitidas, no radía energía electromagnética. Entonces, su energía total E permanece constante.*

4. *Se emite radiación electromagnética si un electrón, que inicialmente se mueve en una órbita de energía total E_i, cambia su movimiento de manera discontinua para moverse en una órbita de energía total E_f. La frecuencia de la radiación emitida ν es igual a la cantidad $(E_i - E_f)$ dividida entre la constante h de Planck.*

El primer postulado hace que el modelo de Bohr tome como base la existencia del núcleo atómico. El segundo postulado introduce la cuantización. Sin embargo, obsérvese la diferencia entre la cuantización de Bohr del *impulso angular orbital* de un electrón que se mueve bajo la influencia de una *fuerza inversa del cuadrado (Coulomb)*

$$L = n\hbar \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \quad (4\text{-}12)$$

y la cuantización de Planck de la *energía* de una partícula, tal como un electrón, que efectúa movimiento armónico simple bajo la influencia de una *fuerza restauradora armónica; $E = nh\nu$, $n = 0, 1, 2, \ldots$* En la siguiente sección se verá que la cuantización del impulso angular orbital del electrón atómico conduce a la cuantización de su energía total pero con una ecuación de cuantización de la energía diferente de la ecuación de Planck. El tercer postulado resuelve el problema de la estabilidad de un electrón que se mueve en una órbita circular, planteado por la emisión de radiación electromagnética del electrón según la teoría clásica, postulando simplemente que este hecho particular de la teoría clásica no es válido para el caso de un electrón atómico. El postulado se basó en el hecho de que *experimentalmente se ha observado que los átomos son estables* aun cuando se contradiga a la teoría clásica. El cuarto postulado

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (4\text{-}13)$$

es realmente el postulado de Einstein referente a que la frecuencia de un fotón de radiación electromagnética es igual a la energía del fotón dividida entre la constante de Planck.

Estos postulados resumen un trabajo esmerado para mezclar la física clásica y la no clásica. Se supone que el electrón moviéndose en una órbita circular obedece a la mecánica clásica y al mismo tiempo se incluye la idea no clásica de cuantización del impulso angular orbital. Se supone que el electrón obedece un hecho de la teoría electromagnética clásica (ley de Coulomb), a la vez que no satisface otro hecho (la emisión de radiación por cuerpos acelerados). Sin embargo, no es sorprendente el que las leyes de la física clásica, que están basadas en la experiencia con sistemas macroscópicos, no sean completamente válidas cuando se trabaja con sistemas microscópicos como lo es el átomo.

4.6 Modelo de Bohr

La justificación de los postulados de Bohr, o de cualquier conjunto de postulados, solamente se puede encontrar comparando las predicciones que derivan de ellos con los resultados experimentales. En esta sección se derivarán algunas de estas predicciones y se compararán con los datos de la sección 4-4.

Considérese un átomo que consiste de un núcleo de carga $+Ze$ y masa M y un solo electrón de carga $-e$ y masa m. Para un átomo de hidrógeno neutro $Z = 1$, para un átomo de helio simplemente ionizado $Z = 2$, para un átomo de litio doblemente ionizado $Z = 3$, etc. Supóngase que el electrón se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo. Inicialmente se supone que la masa del electrón es completamente despreciable comparada con la masá del núcleo y

consecuentemente se asume que el núcleo permanece fijo en el espacio. La condición de estabilidad mecánica del electrón es

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r} \tag{4-14}$$

donde v es la velocidad del electrón en su órbita, y r es el radio de ésta. El primer miembro de esta ecuación es la fuerza de Coulomb que actúa sobre el electrón y el segundo miembro es ma donde a es la aceleración centrípeta que mantiene al electrón en su órbita circular. Ahora, el impulso angular orbital del electrón, $L = mvr$, deberá ser una constante, ya que la fuerza que actúa sobre el electrón está por entero en la dirección radial. Aplicando la condición de cuantización, (4-12) a L, se obtiene

$$mvr = n\hbar \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4-15}$$

Resolviendo para v y substituyendo en (4-14), se obtiene

$$Ze^2 = 4\pi\epsilon_0 mv^2 r = 4\pi\epsilon_0 mr\left(\frac{n\hbar}{mr}\right)^2 = 4\pi\epsilon_0\frac{n^2\hbar^2}{mr}$$

así

$$r_n = 4\pi\epsilon_0\frac{n^2\hbar^2}{mZe^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4-16}$$

y

$$v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{n\hbar} \qquad n = 1, 2, 3 \ldots \tag{4-17}$$

La aplicación de la condición de cuantización del impulso angular ha restringido las órbitas circulares posibles a aquellas cuyos radios están dados por (4-16). Obsérvese que estos radios son proporcionales al cuadrado del *número cuántico n*. Se se evalúa el radio de la órbita más pequeña ($n = 1$) para un átomo de hidrógeno ($Z = 1$) poniendo los valores conocidos de h, m, y e, se obtiene $r = 5.3 \times 10^{-11}$ m $\simeq 0.5$ Å. Posteriormente se verá que el electrón tiene su energía total mínima cuando se encuentra en la órbita correspondiente a $n = 1$. Consecuentemente el radio de esta órbita se podrá interpretar como una medida **del radio de un átomo de hidrógeno en su estado normal, lo cual se ajusta muy bien con la estimación,** mencionada previamente, de que el orden de magnitud de un radio atómico es 1 Å. Por lo tanto, los postulados de Bohr predicen un tamaño razonable para el átomo. Evaluando la velocidad orbital de un electrón en la órbita más pequeña de un átomo de hidrógeno con ayuda de la ecuación (4-17), se obtiene $v = 2.2 \times 10^6$ m/seg. De la ecuación se puede ver que esta es la velocidad máxima posible para un electrón en un átomo de hidrógeno. El hecho de que esta velocidad sea menor que el 1% de la velocidad de la luz es la justificación para utilizar en el modelo de Bohr la mecánica clásica en vez de la mecánica relativista. Por otra parte, la ecuación (4-17) muestra que para valores grandes de Z la velocidad del electrón se hace **relativista y en estos casos no es posible aplicar el modelo. Esta ecuación también muestra el por qué en el** modelo de Bohr no está permitido que el número cuántico n tome el valor $n = 0$, como ocurre en la ecuación de cuantización de Planck.

En seguida calculando la energía total de un electrón atómico que se mueve en una de las órbitas permitidas. Definiendo el cero de la energía potencial cuando el electrón se encuentra a una distancia infinita desde el núcleo. Entonces la energía potencial V para cualquier distancia finita r se puede obtener integrando el trabajo que hará la fuerza de Coulomb actuando desde r hasta ∞. **Entonces**

$$V = -\int_r^\infty \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\,dr = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

La energía potencial es negativa debido a que la fuerza de Coulomb es atractiva y se requiere hacer trabajo para mover al electrón desde r hasta el infinito en contra de esta fuerza. Con la ayuda de (4-14) se puede evaluar la energía cinética del electrón

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r}$$

Entonces, la energía total E del electrón es

$$E = K + V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r} = -K$$

Utilizando (4-16) para r en la ecuación anterior, se tiene

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \quad (4\text{-}18)$$

Obsérvese que *la cuantización del impulso angular orbital del electrón conduce a una cuantización de su energía total.*

La información contenida en la ecuación (4-18) mediante un diagrama de niveles de energía se presenta en la figura 4-11. A la izquierda se muestra la energía de cada nivel expresada en Joules y electron-volts y en el segundo miembro se muestra el número cuántico del nivel. El diagrama está construido de tal manera que la distancia de cualquier nivel al nivel de energía cero es proporcional a la energía del nivel en cuestión. Obsérvese que el menor valor permitido (el más negativo) de la energía total, ocurre para el número cuántico más pequeño $n = 1$ y que conforme n aumenta la energía total del estado cuántico se hace menos negativa, con E aproximándose a cero conforme n se aproxima a infinito. Ya que el estado de menor energía total es, por supuesto, el estado más estable para el electrón, se ve que el estado normal del electrón en un átomo monoelectrónico es el estado para el cual $n = 1$.

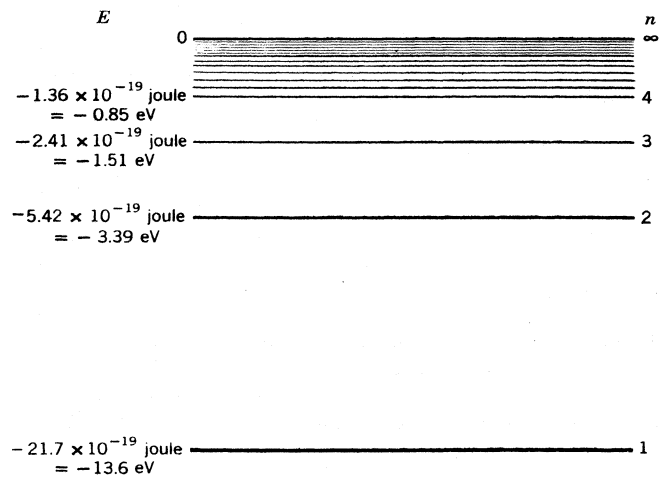


FIGURA 4-11

Diagrama de niveles de energía para el átomo de hidrógeno.

Ejemplo 4-6. Calcular a partir de (4-18) la energía de enlace del átomo de hidrógeno (la energía que liga al electrón con el núcleo).

La energía de enlace es numéricamente igual a la energía del estado más bajo en la figura (4-11), que corresponde a $n = 1$ en (4-18). Con $Z = 1$, esto produce

$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

$$= -\frac{(9.0 \times 10^9 \text{ nt-m}^2/\text{coul}^2)^2 \times 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1.60 \times 10^{-19} \text{ coul})^4}{2 \times (1.05 \times 10^{-34} \text{ joule-seg})^2}$$

$$= -2.17 \times 10^{-18} \text{ joule} = -13.6 \text{ eV}$$

lo cual concuerda muy bien con la energía de enlace observada experimentalmente para el hidrógeno. ◀

A continuación se calculará la frecuencia ν de la radiación electromagnética emitida cuando el electrón sufre una transición del estado cuántico n_i al estado cuántico esto es, cuando un electrón que se mueve inicialmente en una órbita caracterizada por el número cuántico n_i cambia su movimiento de manera discontinua hasta moverse en una órbita caracterizada por el número cuántico n_f. Utilizando el cuarto postulado de Bohr (4-13) y (4-18) se tiene

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = +\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

En términos del recíproco de la longitud de onda $\kappa = 1/\lambda = \nu/c$,

$$\kappa = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c} Z^2\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

o

$$\kappa = R_\infty Z^2\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad \text{donde } R_\infty \equiv \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c} \tag{4-19}$$

donde n_i y n_f son enteros.

Las predicciones esenciales del modelo de Bohr están contenidas en (4-18) y (4-19). Primero se analizará la emisión de radiación electromagnética por un átomo de Bohr monoelectrónico en términos de estas ecuaciones.

1. El estado normal del átomo será el estado en el cual el electrón tiene la energía más baja, es decir, el estado $n = 1$. A este se le llama el *estado base*. (Estado base significa estado fundamental, el término proviene del vocablo alemán *grund* que significa fundamental).

2. En una descarga eléctrica o en algún otro proceso, el átomo recibe energía debido a las colisiones, etc. Esto significa que el electrón deberá sufrir una transición a un estado de mayor energía o *estado excitado*, en el cual $n > 1$.

3. Obedeciendo la tendencia común de todos los sistemas físicos, el átomo emitirá su exceso de energía y regresará al estado base. Esto es acompañado por una serie de transiciones en las cuales el electrón cae sucesivamente a estados excitados de menor energía hasta que finalmente alcanza el estado base. En cada transición se emite radiación electromagnética con una longitud de onda que depende de la energía permitida para el electrón, es decir, de los números cuánticos inicial y final. En un caso típico, el electrón se excitaría hasta un estado $n = 7$ y caería sucesivamente a través de los estados $n = 4$ y $n = 2$ hasta el estado base $n = 1$. De acuerdo con (4-19) se emitirían tres líneas del espectro atómico con los recíprocos de longitud de onda correspondientes a $n_i = 7$ y $n_f = 4$, $n_i = 4$ y $n_f = 2$, y $n_i = 2$ y $n_f = 1$.

4. Durante el proceso de medición de un espectro atómico, tiene lugar un número muy grande de excitaciones y desexcitaciones, de manera que se emite el espectro completo y ocurren todas las transiciones posibles. La ecuación (4-19) proporciona todas las longitudes de onda o recíprocos de éstas de las líneas que constituyen el espectro. En esa expresión se permite que tanto n_i como n_f tomen todos los valores enteros posibles con la única restricción que $n_i > n_f$. Para el hidrógeno ($Z = 1$) considérese el subconjunto de líneas espectrales que provienen de las transiciones en las cuales $n_f = 2$. Según (4-19), los recíprocos de las longitudes de onda de estas líneas están dados por

$$\kappa = R_\infty(1/n_f^2 - 1/n_i^2) \qquad n_f = 2 \quad \text{y} \quad n_i > n_f$$

o

$$\kappa = R_\infty(1/2^2 - 1/n^2) \qquad n = 3, 4, 5, 6, \ldots$$

Que es idéntica a la fórmula para la serie de Balmer del espectro del hidrógeno (4-10), si R_∞ es igual a R_H. De acuerdo con el modelo de Bohr:

$$R_\infty = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}$$

A pesar de que los valores numéricos de algunas de las cantidades que intervienen en esta ecuación no se conocían con suficiente precisión en su tiempo, Bohr evaluó R_∞ en términos de estas cantidades y encontró que el valor resultante concordaba muy bien con el valor experimental de R_H. En la siguiente sección se hará una comparación detallada, utilizando datos recientes, entre el valor experimental de R_H y la predicción de Bohr y se mostrará que ambos concuerdan casi perfectamente.

Según el modelo de Bohr, cada una de las cinco series conocidas para el espectro del hidrógeno proviene de un subconjunto de transiciones en las cuales el electrón llega a cierto estado cuántico final n_f. Para la serie de Lyman $n_f = 1$; para la de Balmer $n_f = 2$, para la de Paschen $n_f = 3$, para la de Brackett $n_f = 4$ y para la de Pfund $n_f = 5$. De estas series, las tres primeras se muestran de manera muy conveniente en el diagrama de niveles de energía de la figura 4-12. La transición que da lugar a una línea partícula de una serie se indica en este diagrama mediante una flecha que va del estado cuántico inicial n_i al estado cuántico final n_f. Solamente se muestran las flechas que corresponden a las primeras líneas de cada serie y al límite de la misma. Puesto que la distancia entre dos niveles de energía cualesquiera es proporcional a la diferencia de energía entre estos dos niveles y en vista de que (4-13) establece que la frecuencia ν (o el recíproco de la longitud de onda) es proporcional a la diferencia de energía, la longitud de cualquiera de las flechas es proporcional a la frecuencia (o recíproco de la longitud de onda) de la línea espectral correspondiente.

Las longitudes de onda de las líneas de todas estas series se satisfacen en forma muy adecuada por (4-19) utilizando el valor de n_f apropiado. Este fue un gran triunfo del modelo de Bohr. El éxito del modelo fue particularmente impresionante debido a que cuando fue desarrollado el modelo por Bohr no habían sido descubiertas las series de Lyman, Brackett y Pfund. La existencia de estas series fue predicha y rápidamente encontradas en el experimento por las personas a quienes deben su nombre.

El modelo trabaja igualmente bien cuando se lo aplica al caso de átomos monoelectrónicos con $Z = 2$, es decir, átomos de helio simplemente ionizados He^+. Estos átomos se pueden producir haciendo pasar una descarga eléctrica violenta (una chispa) a través de helio gas. Esto se manifiesta por la emisión de un espectro más simple que el emitido por los átomos de helio normales. En efecto, el espectro atómico del He^+ es exactamente el mismo que el espectro del hidrógeno con la excepción de que los recíprocos de las longitudes de onda de todas las líneas son casi exactamente cuatro veces mayores; lo cual se explica muy fácilmente en términos del modelo de Bohr haciendo en (4-19) $Z^2 = 4$.

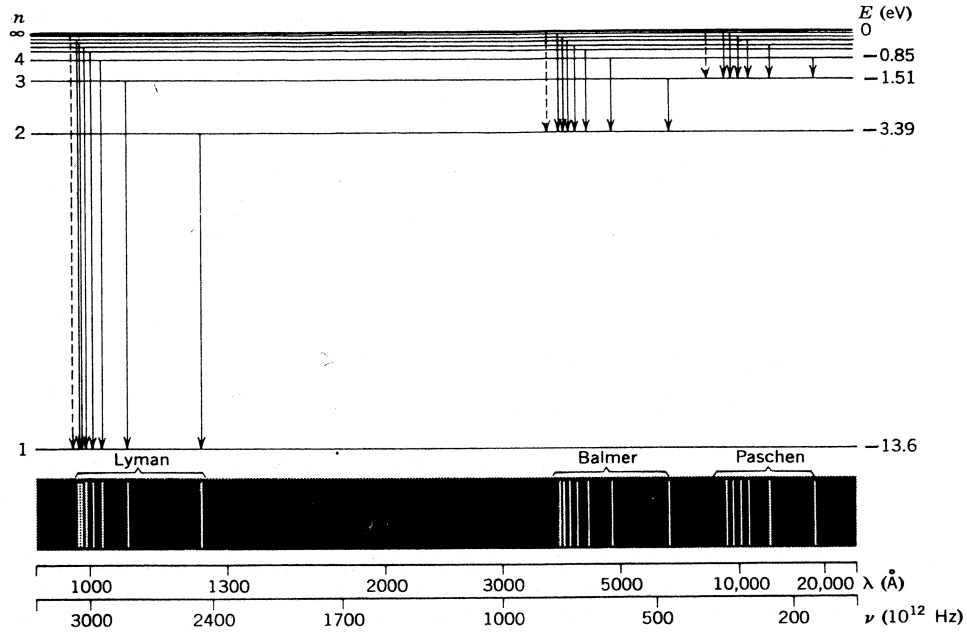


FIGURA 4-12

Arriba: Diagrama de niveles de energía para el hidrógeno con el número cuántico n para cada nivel y algunas de las transiciones que aparecen en el espectro. Entre los niveles marcados $n=4$ y $n=\infty$ hay una infinidad de niveles. *Abajo:* Líneas espectrales correspondientes a las tres series indicadas. Dentro de cada serie, las líneas espectrales observan un patrón regular, aproximándose el límite de la serie al extremo de longitudes de onda corta. Tal como se ha dibujado aquí, ni la escala de la longitud de onda ni la de la frecuencia es lineal, habiéndose escogido simplemente para dar claridad a la ilustración. Una escala lineal para la longitud de onda representaría más fielmente el aspecto real de la placa fotográfica que se obtendría de un espectroscopio. Las series de Brackett y Pfund, que no se muestran, están en la parte del infrarrojo lejano del espectro.

En términos del modelo de Bohr también resulta fácil entender las propiedades del espectro de absorción de los átomos monoelectrónicos. Puesto que el electrón en el átomo deberá tener una energía total exactamente igual a la energía de uno de los estados de energía permitida, el átomo puede absorber solamente cantidades discretas de energía proveniente de la radiación electromagnética incidente. Este hecho conduce a la idea de considerar a la radiación incidente como un haz de fotones y que solamente aquellos cuya frecuencia está dada por $E = h\nu$, donde E es una de las cantidades discretas de energía, pueden ser absorbidos por el átomo. Entonces el proceso de absorber radiación electromagnética es justamente el inverso del proceso de emisión normal y las líneas del espectro de absorción tendrán exactamente las mismas longitudes de onda que las líneas del espectro de emisión. Por lo general el átomo siempre está inicialmente en el estado base $n = 1$ de manera que solamente puede ocurrir el proceso de absorción de $n = 1$ a $n > 1$. Por lo tanto solo se observarán normalmente las líneas de absorción que corresponden a la serie de Lyman (para el hidrógeno). Sin embargo, si el gas que contiene a los átomos absorbentes se encuentra a gran temperatura, entonces, debido a las condiciones algunos de los

átomos se encontrarán inicialmente en el primer estado excitado $n=2$ y se observarán las líneas de absorción correspondientes a la serie de Balmer.

Ejemplo 4-7. Estimar la temperatura de un gas que contiene átomos de hidrógeno y para el cual se observa en el espectro de absorción la serie de Balmer.

La distribución de probabilidad de Boltzmann (véase apéndice C) demuestra que la relación del número n_2 de átomos en el primer estado excitado al número n_1 de átomos en el estado base, para una muestra grande en equilibrio a temperatura T, es

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{e^{-E_2/kT}}{e^{-E_1/kT}}$$

donde k es la constante de Boltzmann, $k = 1.38 \times 10^{-23}$ joule/°K $= 8.62 \times 10^{-5}$ eV/°K. Para átomos de hidrógeno las energías de estos dos estados están dadas en el diagrama de niveles de energía de la figura 4-11: $E_1 = -13.6$ eV, $E_2 = -3.39$ eV. Entonces

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-(-3.39+13.6)\text{ eV}/(8.62\times10^{-5}\text{ eV/°K})T} = e^{-1.18\times10^5\text{ °K}/T}$$

En consecuencia, solamente existirá inicialmente en el primer estado excitado una fracción significativa de los átomos de hidrógeno si T es del orden de o mayor que 10^5 °K; y solamente podrán producir líneas de absorción de la serie de Balmer cuando absorbe energía estando en ese nivel.

En realidad, se observan líneas de absorción en el hidrógeno gaseoso de algunas atmósferas estelares: lo cual proporciona una forma para estimar la temperatura de la superficie de una estrella. ◀

4.7 Corrección por masa nuclear finita

En la sección anterior se supuso que la masa del núcleo atómico era infinitamente grande comparada con la masa de los electrones del átomo, de manera que el núcleo permanecía fijo en el espacio. Esta es una buena aproximación aun para el hidrógeno que contiene al núcleo más ligero, ya que la masa de este núcleo es aproximadamente 2000 veces mayor que la masa del electrón. Sin embargo, los datos espectroscópicos son tan precisos, que antes de que se haga una comparación numérica detallada de estos datos con el modelo de Bohr se deberá tomar en cuenta el hecho de que la masa nuclear en realidad es finita. En tal caso tanto el electrón como el núcleo se moverán alrededor de su centro de masas común. Sin embargo, no es difícil demostrar que en ese sistema planetaroide el electrón se mueve en relación al núcleo como si el núcleo estuviera fijo y la masa m del electrón estuviera reducida ligeramente al valor μ, que es la *masa reducida* del sistema. Las ecuaciones del movimiento del sistema son las mismas que las que se consideraría si simplemente se substituye μ por m, donde

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \tag{4-20}$$

es menor que m por un factor $1/(1 + m/M)$ y M es la masa del núcleo.

Para manejar esta situación Bohr modificó su segundo postulado para exigir que el *impulso angular orbital total del átomo, L, fuera un múltiplo entero de la constante de Planck dividido entre* 2π. Lo cual se logra generalizando (4-15) a

$$\mu v r = n\hbar \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{4-21}$$

Usando μ en vez de m en esta ecuación, se toma en cuenta tanto el impulso angular del núcleo como el del electrón. Haciendo modificaciones similares al resto de la derivación de Bohr para el caso de masa nuclear finita, se encuentra que todas las ecuaciones son idénticas a las obtenidas

con anterioridad excepto que la masa del electrón m se ha substituido por la masa reducida μ. En particular, la fórmula para los recíprocos de las longitudes de onda de las líneas espectrales resulta

$$\kappa = R_M Z^2\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad \text{donde } R_M \equiv \frac{M}{m+M} R_\infty \equiv \frac{\mu}{m} R_\infty \quad (4\text{-}22)$$

La cantidad R_M es *la constante de Rydberg para un núcleo de masa M*. Conforme $M/m \to \infty$, resulta que $R_M \to R_\infty$, que es la constante de Rydberg para un núcleo infinitamente pesado. En general, la constante de Rydberg R_M es menor que R_∞ por el factor $1/(1 + m/M)$. Para el caso más extremo que es el de hidrógeno, $M/m = 1836$ y R_M es menor que R_∞ por aproximadamente una parte en 2000.

Si de (4-22 se evalua R_H utilizando los valores aceptados comunmente para las cantidades m, M, e, c y h, se encuentra $R_H = 10968100\ \text{m}^{-1}$. Comparando este valor con el valor experimental de R_H dado en la sección 4-4 se vé que el modelo de Bohr corregido por masa nuclear finita concuerda con los datos espectroscópicos en ¡tres partes en 100.000!

Ejemplo 4-8. En el capítulo 2 se habló del "átomo" *positronio* que consiste de un positrón y un electrón que se mueven alrededor de su centro de masas, el cual se encuentra equidistante de ambos.

(a) Si tal sistema fuera un átomo normal, ¿Cómo sería su espectro de emisión comparado con el del átomo de hidrógeno?

En este caso la masa "nuclear" M es la del positrón, que es igual a m, la masa del electrón. Por lo tanto la masa reducida (4-20) es

$$\mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{m^2}{2m} = \frac{m}{2}$$

De acuerdo con (4-22) la constante de Rydberg correspondiente R_M es

$$R_M = \frac{m}{m+m} R_\infty = \frac{R_\infty}{2}$$

Los estados de energía del átomo positronio entonces estarán dados por

$$E_{\text{positronio}} = -\frac{R_M hcZ^2}{n^2} = -\frac{R_\infty hcZ^2}{2n^2}$$

y los recíprocos de las longitudes de onda de las líneas espectrales emitidas serán

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{R_\infty}{2} Z^2\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Las frecuencias de las líneas emitidas deberán ser entonces la mitad y las longitudes de onda el doble de las del átomo de hidrógeno (con un núcleo infinitamente pesado), siendo Z igual a uno, tanto para el positronio como para el hidrógeno.

(b) ¿Cuál sería el radio de la órbita para el estado base del positronio?

Simplemente se remplaza m por $\mu = m/2$ en (4.16) y se encuentra

$$r_{\text{positronio}} \qquad \frac{4\pi\epsilon_0 n^2\hbar^2}{\mu Z e^2} = 2\frac{4\pi\epsilon_0 n^2\hbar^2}{mZe^2} = 2r_{\text{hidrógeno}}$$

Por lo tanto, para cualquier estado cuántico n el radio del electrón relativo al "núcleo" es dos veces mayor en el átomo positronio que en el átomo de hidrógeno (con núcleo infinitamente pesado). ◀

Ejemplo 4-9. Un átomo *muónico* contiene un núcleo de carga Ze y un *muón* negativo, μ^-, que se mueve alrededor de él. El μ^- es una partícula elemental con carga $-e$ y una masa que es 207 veces mayc-

que la masa de un electrón. Tal átomo se forma cuando un protón, o algún otro núcleo, captura un μ^-.

(a) Calcular el radio de la primera órbita de Bohr para un átomo muónico con $Z = 1$.

La masa reducida del sistema, con $m_{\mu^-} = 207m_e$ y $M = 1836m_e$, es, de (4-20)

$$\mu = \frac{207m_e \times 1836m_e}{207m_e + 1836m_e} = 186m_e$$

Entonces, de (4-16) con $n = 1$, $Z = 1$, y $m = 186m_e$, se obtiene

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{186m_e e^2} = \frac{1}{186} \times 5.3 \times 10^{-11}\,\text{m} = 2.8 \times 10^{-13}\,\text{m} = 2.8 \times 10^{-3}\,\text{Å}$$

Por lo tanto el μ^- está más cerca de la superficie del núcleo (protón) de lo que está el electrón en el átomo de hidrógeno. Este es el hecho que hace interesantes a los átomos muónicos, cuyo estudio proporciona información acerca de las propiedades nucleares.

(b) Calcular la energía de enlace de un átomo muónico con $Z = 1$. De (4-18) con $Z = 1$, $n = 1$, y $m = \mu = 186m_e$, se tiene

$$E = -186\frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} = -186 \times 13.6\,\text{eV} = -2530\,\text{eV}$$

para la energía del estado base. En consecuencia la energía de enlace es 2530 eV.

(c) ¿Cuál es la longitud de onda de la primera línea de la serie de Lyman para este átomo? De (3-22) con $Z = 1$ se tiene

$$\kappa = R_M\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Para la primera línea de Lyman, $n_i = 2$ y $n_f = 1$. En este caso, $R_M = (\mu/m_e)R_\infty = 186R_\infty$. Por lo tanto

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = 186R_\infty\left(1 - \frac{1}{4}\right) = 139.5R_\infty$$

Con $R_\infty = 109737\ \text{cm}^{-1}$ se obtiene

$$\lambda \simeq 6.5\ \text{Å}$$

de modo que las líneas de Lyman se encuentran en la región de los rayos X y por lo tanto se necesitan técnicas de rayos X para estudiar el espectro de los átomos muónicos. ◀

Ejemplo 4-10. El hidrógeno ordinario contiene aproximadamente una parte en 6000 de *deuterio* o hidrógeno pesado. Este es un átomo de hidrógeno cuyo núcleo contiene un protón y un neutrón. ¿Cómo afectará al espectro atómico esta masa nuclear doble?

El espectro sería idéntico si no fuera por la corrección por masa nuclear finita. Para un átomo de hidrógeno normal

$$R_{\text{H}} = R_\infty\frac{\mu}{m} = \frac{R_\infty}{\left(1 + \frac{m}{M}\right)} = \frac{109737\ \text{cm}^{-1}}{\left(1 + \frac{1}{1836}\right)} = 109678\ \text{cm}^{-1}$$

Para un átomo de hidrógeno pesado o deuterio

$$R_{\text{D}} = R_\infty\frac{\mu}{m} = \frac{R_\infty}{\left(1 + \frac{m}{M}\right)} = \frac{109737\ \text{cm}^{-1}}{\left(1 + \frac{1}{2 \times 1836}\right)} = 109707\ \text{cm}^{-1}$$

Ya que R_D es un poquito mayor que R_H, las líneas espectrales del átomo de deuterio estarán ligeramente corridas hacia las longitudes de onda cortas en relación a las líneas del hidrógeno.

De hecho, el deuterio fue descubierto en 1932 por H.C. Urey quien observó el corrimiento mencionado de las líneas espectrales. Es posible aumentar la intensidad de las líneas del deuterio, las cuales ordinariamente son difíciles de detectar, aumentando la concentración del isótopo pesado por encima de su valor normal. Entonces se observan pares de líneas de hidrógeno de las cuales las que se encuentran hacia las longitudes de onda corta corresponden exactamente a las predichas por la expresión para R_D escrita anteriormente. La resolución necesaria es fácil de obtener, así por ejemplo el par correspondiente a la línea H_α- estará separado aproximadamente 1.8 Å que es varios cientos de veces mayor que la separación mínima resoluble. ◀

4.8 Estados de energía atómicos

El modelo de Bohr predice que la energía total de un electrón en un átomo está cuantizada. Por ejemplo (4-18) proporciona los valores de la energía permitidos para el electrón en un átomo monoelectrónico. Sin embargo, no se ha intentado derivar expresiones similares para los electrones de un átomo multielectrónico, pero es obvio, de acuerdo con el modelo, que la energía total de cada uno de los electrones también deberá estar cuantizada y consecuentemente deberá ocurrir lo mismo para la energía total del átomo. La teoría de Planck de la radiación del cuerpo negro también había predicho que en el proceso de emisión y absorción de radiación los átomos en la cavidad se comportarían como si tuvieran estados de energía cuantizados. Por lo tanto, según la teoría cuántica antigua cualquier átomo solamente puede tener ciertos estados de energía separados de manera discreta.

La confirmación directa de que los estados de energía interna de un átomo están cuantizados provino de un experimento simple realizado en 1914 por Franck y Hertz. La figura 4-13 indica el tipo de aparato utilizado por estos investigadores. Los electrones son emitidos térmicamente a una energía baja desde el cátodo caliente C y son acelerados hacia el ánodo A por un potencial V aplicado entre los dos electrodos. Algunos de los electrones pasan a través de los agujeros en A y viajan hacia la placa P. La energía cinética con la que éstos abandonan la placa A es suficiente como para vencer el pequeño potencial de frenamiento V_r aplicado entre P y A. Los átomos del gas o vapor por investigar se encuentran dentro del tubo a una presión baja. El experimento consiste en medir la corriente de electrones que alcanzan P (indicada por la corriente I que fluye a través del medidor) como una función del voltaje acelerador V.

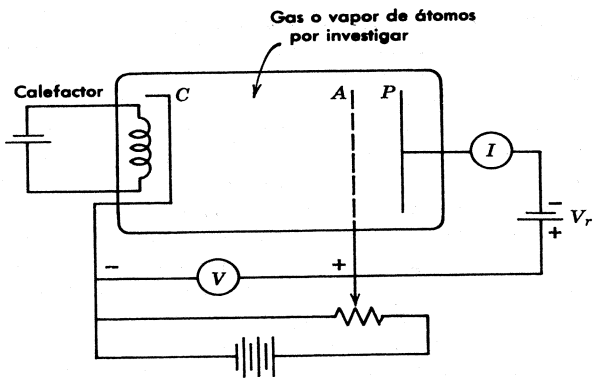


FIGURA 4-13

Esquema del aparato utilizado por Franck y Hertz para probar que en los átomos los estados de energía están cuantizados.

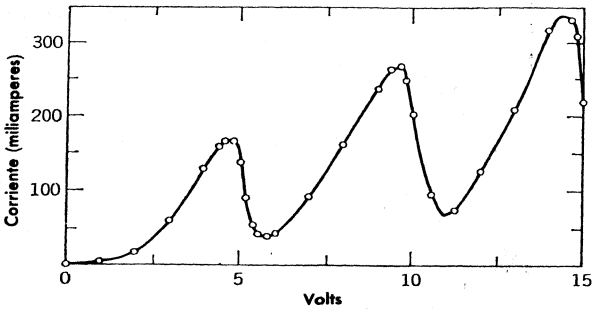


FIGURA 4-14

Forma en la que depende la corriente del voltaje en un experimento de Franck-Hertz.

El primer experimento se realizó con vapor de Hg en el tubo. La figura 4-14 muestra la naturaleza de los resultados. Para voltajes de aceleración pequeños se observa que la corriente I aumenta al aumentar el voltaje V, pero cuando éste alcanza 4.9V, la corriente cae bruscamente; lo cual fue interpretado como una indicación de que al alcanzar los electrones una energía cinética de 4.9 eV, bruscamente se iniciaba una interacción entre los electrones y los átomos de Hg. Aparentemente una fracción significativa de los electrones de esta energía excitan a los átomos de Hg y al hacerlo pierden completamente su energía cinética. Si V es sólo ligeramente mayor que 4.9 V el proceso de excitación ocurrirá justamente enfrente del ánodo A, y después del proceso los electrones no pueden ganar energía cinética suficiente en su caída hacia A como para vencer el potencial de **frenamiento** V_r y alcanzar la placa P. A un V un poco mayor los electrones pueden ganar energía cinética suficiente después del proceso de excitación como para vencer V_r y alcanzar P. Lo brusco de la caída en la curva indica que los electrones de energía menor a 4.9 eV son incapaces de transferir su energía a un átomo de Hg. Esta interpretación es consistente con la existencia de estados de energía discretos para el átomo de Hg. Suponiendo que el primer estado excitado del Hg es 4.9 eV mayor que la energía del estado base, un átomo de Hg sería incapaz de aceptar energía de los electrones que lo bombardean a menos que éstos tuvieran 4.9 eV como mínimo.

Ahora, si en realidad la separación entre el estado base y el primer estado excitado es 4.9eV, debería existir una línea en el espectro de emisión del Hg que corresponda a una pérdida en el átomo de 4.9 eV al ocurrir una transición del primer estado excitado al estado base. Franck y Hertz encontraron que cuando la energía de los electrones de bombardeo es menor que 4.9 eV no se emite ninguna línea espectral del vapor de Hg contenido en el tubo y cuando la energía es un poco mayor solamente se ve una línea en el espectro. La longitud de onda de esta línea es de 2536 Å, que corresponde exactamente a un fotón de energía de 4.9 eV.

El experimento de Franck y Hertz viene a proporcionar una evidencia contundente de la cuantización de la energía de los átomos. También proporciona un método para la medición directa de las diferencias de energía entre los estados cuánticos de un átomo. ¡Las respuestas aparecen en la carátula del vóltmetro! Cuando la curva de I contra V se extiende para voltajes mayores se encuentran picos adicionales. Algunos se deben a que los electrones excitan en varias ocasiones en sus recorridos de C a A al primer estado excitado de los átomos; pero otros se deben a la excitación de los estados excitados superiores. A partir de la posición de estos picos, es posible medir directamente las diferencias de energía entre los estados excitados superiores y el estado base.

Otro método experimental para determinar las separaciones entre los estados de energía de un átomo es medir su espectro atómico y entonces construir empíricamente un conjunto de

estados de energía que reproduzcan dicho espectro. En la práctica esto es muy difícil de hacer ya que el conjunto de líneas que constituyen el espectro, así como el conjunto de estados de energía son muy complicados; sin embargo, este método al igual que todas las técnicas espectroscópicas es muy preciso. En todos los casos en los que las determinaciones de separación entre niveles de energía de ciertos átomos se han hecho utilizando esta técnica y la técnica de Franck-Hertz, se ha encontrado una excelente concordancia en los resultados.

Con objeto de mostrar el análisis anterior, en la figura 4-15 se muestra una representación considerablemente simplificada de los estados de energía del Hg en términos de un diagrama de niveles de energía. Del experimento de Franck y Hertz se sabe que las separaciones entre el estado base y el primero y segundo estados excitados son 4.9 eV y 6.7 eV. Es posible confirmar estos números y de hecho determinarlos con mucha mayor precisión mediante la medición de las longitudes de onda de las dos líneas espectrales que corresponden a las transiciones de un electrón en el átomo de Hg desde estos dos estados al estado base. Por el experimento de Franck-Hertz no está determinada la energía $\mathscr{E} = -10.4$ eV, del estado base con relación a un estado de energía total igual a cero. Sin embargo, es posible encontrarla midiendo la longitud de onda de la línea que corresponde a una transición de un electrón atómico desde un estado con energía total igual a cero hasta el estado base. Este es el límite de la serie que termina en el estado base. También es posible medir la energía $\mathscr{E}$ midiendo la energía que es necesario alimentar a un átomo de Hg para mandar a uno de sus electrones desde el estado base a un estado de energía total igual a cero. Puesto que un electrón con energía total cero ya no permanece ligado al átomo, $\mathscr{E}$ es la energía necesaria para ionizar al átomo y por lo tanto se le denomina *energía de ionización*.

Por encima del estado discreto más alto en $E = 0$ están los estados de energía del sistema que consisten de un electrón no ligado más un átomo de Hg ionizado. *La energía total de un electrón no ligado (un electrón libre con $E > 0$) no está cuantizada.* Entonces, es posible para el electrón cualquier energía $E > 0$ y los estados de energía forman un continuo. Es posible excitar al electrón desde su estado base hasta un estado del continuo si el átomo de Hg recibe una energía mayor que 10.4 eV. Inversamente, para un átomo de Hg ionizado es posible capturar un electrón en uno de los estados cuantizados del átomo neutro. En este proceso se emitirá radiación con una frecuencia mayor que el límite de la serie correspondiente y su valor exacto dependerá de la energía E inicial del electrón libre. Puesto que E puede tener cualquier valor, el espectro de Hg deberá tener un continuo que se extenderá más allá de cualquier límite de la serie en la dirección en la que crece la frecuencia. En realidad es posible ver esto experimentalmente aunque con algo de dificultad. Aunque estos comentarios concernientes al continuo de estados de energía para $E > 0$ y sus consecuencias se han hecho en relación con el átomo de Hg, son igualmente válidos para todos los átomos.

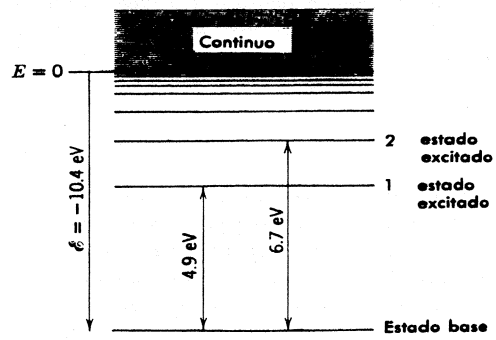


FIGURA 4-15

Diagrama de niveles de energía para el mercurio considerablemente simplificado. Por encima del nivel discreto más alto con $E = 0$ existe un continuo de niveles.

4.9 Interpretación de las reglas de cuantización

El éxito del modelo de Bohr visto a través de su concordancia con el experimento fue realmente muy impresionante, pero sólo acentuó la naturaleza misteriosa de los postulados sobre los que se basa el modelo. Uno de los mayores misterios fue la cuestión de la relación entre la cuantización de Bohr del impulso angular de un electrón que se mueve en una órbita circular y la cuantización de Planck de la energía total de un ente, tal como un electrón, que ejecuta un movimiento armónico simple. En 1916 Wilson y Sommerfeld arrojaron algo de luz sobre este asunto al enunciar un conjunto de reglas para la cuantización de cualquier sistema físico para el cual las coordenadas fueran funciones periódicas del tiempo. Estas reglas incluían como casos especiales tanto la cuantización de Bohr como la de Planck y vinieron a ampliar considerablemente el intervalo de aplicabilidad de la teoría cuántica. Estas reglas se pueden enunciar como sigue:

Para cualquier sistema físico en el cual las coordenadas sean funciones periódicas del tiempo existe una condición cuántica para cada coordenada. Estas condiciones cuánticas son

$$\oint p_q \, dq = n_q h \tag{4-23}$$

donde q es una de las coordenadas, p_q es el impulso asociado con esa coordenada, n_q es un número cuántico que toma valores enteros y $\oint$ significa que la integración se toma sobre un período de la coordenada q.

El significado de estas reglas se puede mostrar mejor en términos de algunos ejemplos específicos. Considérese un oscilador armónico simple unidimensional. Su energía total se puede escribir, en términos de la posición y del impulso, como

$$E = K + V = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

o

$$\frac{p_x^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/k} = 1$$

La integral de cuantización $\oint p_x \, dx$ para la relación entre p_x y x impuesta para esta ecuación, se puede evaluar más fácilmente si se considera una interpretación geométrica. La relación entre p_x y x es la ecuación de una elipse y cualquier estado de movimiento del oscilador está representado por un punto en una gráfica de esta ecuación en un espacio bidimensional que tenga como coordenadas p_x y x. A ese espacio se le denomina el espacio fase y a la gráfica el *diagrama fase* del oscilador lineal (véase figura 4-16). Durante un ciclo de la oscilación el punto que representa la posición y el impulso de la partícula viaja una vez alrededor de la elipse. Por comparación con nuestra ecuación se puede ver que los semiejes a y b de la elipse $p_x^2/b^2 + x^2/a^2 = 1$ son

$$b = \sqrt{2mE} \quad \text{y} \quad a = \sqrt{2E/k}$$

Como el área de una elipse es πab, el valor de la integral $\oint p_x dx$ es justamente esta área. (Para ver esto obsérvese que la integral sobre una oscilación completa es igual a una integral en la cual el punto representativo viaja desde $x = -a$ hasta $x = +a$ sobre la mitad superior de la elipse, más una integral en la cual el punto viaja de regreso hasta $x = -a$ sobre la mitad inferior. En la primera integral tanto p_x como dx son positivas y su valor es igual al área encerrada entre la mitad superior y el eje x; en la segunda tanto p_x como dx son negativas, de modo que el valor de

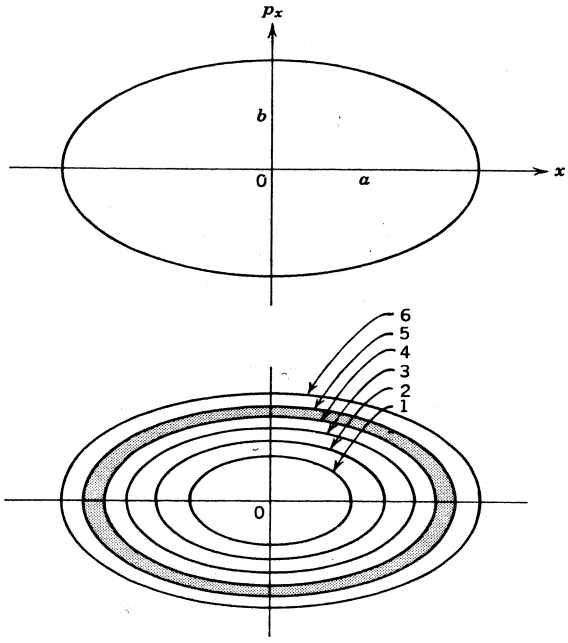


FIGURA 4-16

Arriba: Diagrama en el espacio fase del movimiento del punto representativo de un oscilador lineal armónico simple. *Abajo:* Los estados de energía permitida del oscilador están representados por elipses cuyas áreas en el espacio fase están dadas por nh. El espacio entre elipses adyacentes (por ejemplo el área sombreada) tiene un área h.

la integral es positivo e igual al área encerrada entre la mitad inferior de la elipse y el eje x). Entonces se obtiene

$$\oint p_x \, dx = \pi ab$$

En nuestro caso

$$\oint p_x \, dx = \frac{2\pi E}{\sqrt{k/m}}$$

pero

$$\sqrt{k/m} = 2\pi\nu$$

donde ν es la frecuencia de la oscilación de modo que

$$\oint p_x \, dx = E/\nu$$

Si ahora se utiliza la regla de cuantización de Wilson-Sommerfeld (4-23), se obtiene

$$\oint p_x \, dx = E/\nu = n_x h \equiv nh$$

o

$$E = nh\nu$$

que es idéntica a la ley de cuantización de Planck.

Obsérvese que los estados permitidos para la oscilación están representados en el espacio fase por una serie de elipses siendo h el área encerrada entre dos elipses sucesivas (ver figura 4-16). Nuevamente se ve que en la situación clásica que corresponde a que $h \to 0$, todos los valores de E y por lo tanto todas las elipses serían permitidas. A la cantidad $\oint p_x\, dx$ se le denomina frecuencia *integral de fase* y en la física clásica es la integral sobre una oscilación del movimiento de la cantidad dinámica denominada acción. Por lo tanto, la cuantización de la energía de Planck es equivalente a la *cuantización de la acción.*

Mediante la regla de Wilson-Sommerfeld (4-23) también es posible deducir la cuantización de Bohr del impulso angular. Un electrón que se mueve en una órbita circular de radio r tiene un impulso angular $mvr = L$, que es constante. La coordenada angular es θ , y es una función periódica del tiempo. Es decir, θ en función de t es una función diente de sierra, que aumenta linealmente desde cero hasta 2π rad en un período y repite este patrón en los períodos sucesivos. La regla de cuantización

$$\oint p_q\, dq = n_q h$$

resulta en este caso

$$\oint L\, d\theta = nh$$

y

$$\oint L\, d\theta = L\int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi L$$

así que

$$2\pi L = nh$$

o

$$L = nh/2\pi \equiv n\hbar$$

que es idéntica a la ley de cuantización de Bohr.

En 1924 de Broglie dio una interpretación más física a la ley de cuantización de Bohr. La cuantización de Bohr del impulso angular se puede escribir como en (4-15) como

$$mvr = pr = nh/2\pi \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

donde p es el impulso lineal del electrón en una órbita permitida de radio r. Si en esta ecuación se substituye la expresión para p en términos de la correspondiente longitud de onda de de Broglie

$$p = h/\lambda$$

la ecuación de Bohr resulta

$$hr/\lambda = nh/2\pi$$

o

$$2\pi r = n\lambda \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \quad (4\text{-}24)$$

Entonces *las órbitas permitidas son aquellas en las cuales la circunferencia de la órbita puede contener exactamente un número entero de longitudes de onda de de Broglie.*

Imagínese al electrón moviéndose en una órbita circular a rapidez constante y con la onda asociada siguiéndolo. Entonces, la onda de longitud de onda λ, se arrolla alrededor de la órbita circular. La onda resultante que se produce tendrá intensidad cero para cualquier punto, a menos que la onda en cada viaje se encuentre exactamente en fase en ese punto con la onda en otro viaje. Si en cada viaje las ondas están perfectamente en fase se juntan perfectamente en órbitas que contienen un número entero de longitudes de onda de de Broglie tal como se muestra en la figura 4-17. Pero la condición para que esto suceda es justamente la condición para que se satisfaga (4-24). Si se violara esta ecuación, entonces en un número grande de viajes las ondas se interferirían entre sí, de tal manera, que su intensidad promedio sería cero. Puesto que la intensidad promedio de las ondas $\overline{\Psi^2}$, es supuestamente una medida de donde se localiza la partícula, es posible interpretar esto como la imposibilidad de que un electrón se encuentre en tal órbita.

Esta descripción ondulatoria no sugiere un movimiento progresivo, por el contrario, sugiere ondas estacionarias como en una cuerda estirada de longitud determinada. En este último caso solamente están permitidas ciertas longitudes de onda o frecuencias de vibración. Una vez que se ha excitado uno de tales modos, la vibración continuará indefinidamente de no haber amortiguamiento. Sin embargo, para obtener ondas estacionarias se necesita una onda de igual amplitud que viaje en dirección opuesta. Para el caso del átomo este requisito se satisface presumiblemente por el hecho de que el electrón puede viajar una órbita en cualquier dirección y mantener la magnitud del impulso angular requerida por Bohr. De esta manera la interpretación de onda estacionaria de de Broglie y mostrada en la figura 4-17 proporciona una base satisfactoria para la regla de cuantización de Bohr para este caso y de la regla de Wilson-Sommerfeld para el caso general.

Existe otro ejemplo de un sistema en el cual el origen de la ley de Wilson-Sommerfeld se puede entender en términos de los requisitos de que las *ondas de de Broglie asociadas a una partícula que realiza un movimiento periódico formen un conjunto de ondas estacionarias.* Considérese una partícula que se mueve libremente a lo largo del eje x y dentro de los límites $x = -a/2$ y $x = +a/2$. Se puede pensar este sistema como aproximadamente representativo del movimiento de un electrón de conducción en una pieza metálica unidimensional que se extiende desde $-a/2$ hasta $+a/2$. La partícula va y viene entre los extremos de la región con un impulso $\vec{p}_x$ que cambia de signo en cada rebote pero mantiene constante su magnitud P. Entonces la ecuación de Wilson-Sommerfeld toma la forma

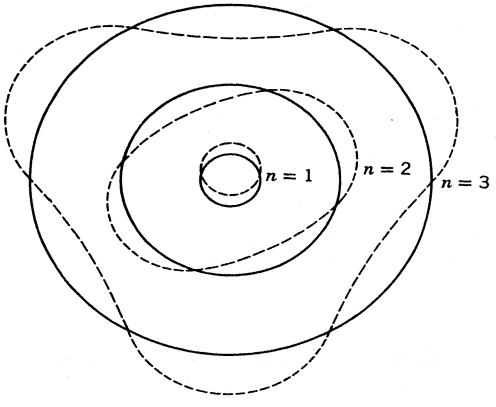


FIGURA 4-17

Ilustración de las ondas estacionarias de de Broglie en las primeras tres órbitas de Bohr. Por supuesto que los nodos se pueden encontrar en cualquier parte de cada órbita siempre y cuando los espacios entre ellos sean los mostrados.

$$\oint p_x\,dx = p\oint dx = p2a = nh$$

o

$$n\frac{h}{p} = 2a \tag{4-25}$$

Pero h/p es justamente la longitud de onda λ de de Broglie de la partícula, de modo que

$$n\lambda = 2a$$

Entonces, justamente caben un número entero de ondas de de Broglie en la distancia cubierta por la partícula, lo cual permite que las ondas asociadas con viajes sucesivos se encuentren en fase para formar una onda estacionaria.

En los capítulos siguientes se verá que las propiedades de las ondas estacionarias son igualmente importantes para las condiciones de cuantización de la mecánica cuántica de Schrödinger. Los detalles independientes del tiempo de las ondas estacionarias asociadas con los electrones en el estado base de un átomo, hacen posible el entender de una manera sencilla el por qué el electrón no emite radiación electromagnética y cae en espiral al núcleo.

4.10 El modelo de Sommerfeld

Una de las aplicaciones más importantes de las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld es el caso de un átomo de hidrógeno en el cual se supone que el electrón se puede mover en órbitas *elípticas*. Esto fue hecho por Sommerfeld en un intento por explicar la estructura *fina* del espectro del hidrógeno. La estructura fina es un desdoblamiento de las líneas espectrales en varias componentes distintas y que se presenta en todos los espectros atómicos. Para observar esta estructura es necesario contar con un equipo de muy alta resolución ya que la separación entre las componentes adyacentes de una línea es del orden de 10^{-4} veces la separación entre líneas adyacentes (en términos del recíproco de la longitud de onda). Según el modelo de Bohr esto significaría que se tendría que interpretar un estado de energía simple del átomo de hidrógeno como constituido por muchos estados sumamente próximos entre sí.

Lo primero que hizo Sommerfeld fue evaluar el tamaño y la forma de las órbitas elípticas permitidas así como la energía total de un electrón moviéndose en una de ellas, utilizando para ello las fórmulas de la mecánica clásica. Una vez descrito el movimiento en término de las coordenadas polares r y θ, aplicó las dos condiciones cuánticas

$$\oint L\,d\theta = n_\theta h$$

$$\oint p_r\,dr = n_r h$$

La primera de ellas conduce a la misma restricción sobre el impulso angular orbital

$$L = n_\theta \hbar \qquad\qquad n_\theta = 1, 2, 3, \ldots$$

que existía para la teoría de las órbitas circulares. La segunda condición (que no es aplicable en el caso límite de órbitas circulares) conduce a la siguiente relación entre L y la relación del semieje mayor y el semieje menor de la elipse a/b

$$L(a/b - 1) = n_r \hbar \qquad\qquad n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Mediante la aplicación de una condición de estabilidad mecánica análoga a la (4-14) se obtiene una tercera ecuación. De estas ecuaciones Sommerfeld evaluó el semieje mayor y el semieje

menor que dan la forma y tamaño de las órbitas elípticas y también la energía total E de un electrón en tal órbita. Los resultados son

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2} \tag{4-26a}$$

$$b = a\frac{n_\theta}{n} \tag{4-26b}$$

$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2} \tag{4-26c}$$

donde μ es la masa reducida del electrón y el número cuántico n está definido por

$$n \equiv n_\theta + n_r$$

Ya que $n_\theta = 1,2,3,\ldots$ y $n_r = 0,1,2,3,\ldots$ n puede tomar los valores

$$n = 1, 2, 3, 4, \ldots$$

Por un valor de n dado n_θ solamente puede tomar los valores

$$n_\theta = 1, 2, 3, \ldots, n$$

Al entero n se le denomina *número cuántico principal* y a n_θ *número cuántico azimutal.*

La ecuación (4-26b) muestra que la forma de la órbita (la relación del semieje mayor al semieje menor) está determinada por la relación de n_θ a n. Para $n_\theta = n$ las órbitas son círculos de radio a. Obsérvese que la ecuación que da a en términos de n es idéntica con (4-16), que es la ecuación que da el radio de las órbitas circulares de Bohr. (Recuérdese que si se quiere tomar en cuenta a la masa nuclear finita se tiene que substituir la m de la ecuación (4-16) por μ). La figura 4-18 muestra, a escala, las órbitas posibles correspondientes a los primeros tres valores del número cuántico principal. Correspondiendo a cada uno de los valores del número cuántico principal n existen n órbitas permitidas distintas. Una de ellas, la órbita circular, es justamente la órbita descrita por el modelo original de Bohr. Las otras son elípticas. Pero la ecuación (4-26c) establece que sin importar cuán diferentes sean las trayectorias seguidas por un electrón que se mueve en las órbitas posibles para una n dada, la energía total del electrón es la misma ya que la energía total solamente depende de n. Se dice que las órbitas están *degeneradas* cuando varias de ellas están caracterizadas por el mismo valor de n. Las energías de los diferentes estados de movimiento "se degeneran" a la misma energía total.

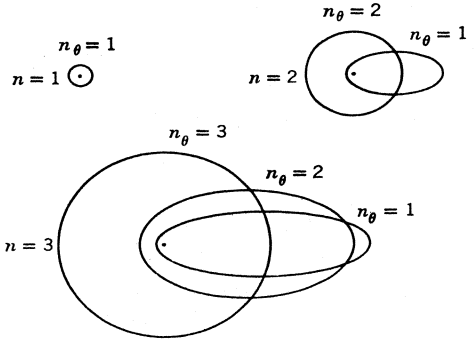


FIGURA 4-18

Algunas órbitas elípticas de Bohr-Sommerfeld. El núcleo está localizado en el foco común de las elipses y se indica por el punto.

Esta degeneración en la energía total de un electrón que sigue órbitas de forma diferente pero con n común es el resultado de un balance muy delicado entre las energías cinética y potencial que es característico al tratar una fuerza de Coulomb inversa del cuadrado, por los métodos de la mecánica clásica. Este mismo fenómeno se presenta al tratar el movimiento planetario o de satélites que están gobernados por la fuerza gravitacional inversa del cuadrado. Así por ejemplo un satélite puede ser lanzado en una cualesquiera de una familia de órbitas elípticas que corresponden todas a la misma energía total y tienen el mismo semieje mayor. Por supuesto que no existe cuantización de los parámetros de las órbitas en estos casos macroscópicos, pero por lo que concierne a la degeneración es completamente análoga al caso del átomo de hidrógeno.

Sommerfeld "quitó la degeneración" en el átomo de hidrógeno tratando el problema *relativísticamente*. En el análisis que siguió a (4-17) se demostró que para un electrón en un átomo de hidrógeno $v/c \simeq 10^{-2}$ o menos y entonces cabría esperar que las correcciones relativistas a la energía total, debidas a la variación relativista de la masa del electrón que son del orden de $(v/c)^2$, fueran del orden de 10^{-4} que es justamente el orden de magnitud de los desdoblamientos en los estados de energía del hidrógeno que se requerían para explicar la estructura fina del espectro del hidrógeno. El tamaño real de la corrección depende de la velocidad promedio del electrón, la cual a su vez depende de la elipticidad de la órbita. Después de unos cálculos que son demasiado tediosos como para reproducirlos aquí, Sommerfeld demostró que la energía total de un electrón en una órbita caracterizada por los números cuánticos n y n_θ es igual a

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2n^2\hbar^2}\left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n}\left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n}\right)\right] \tag{4-27a}$$

La cantidad α es un número puro llamado la *constante de estructura fina*, cuyo valor es

$$\alpha \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c} = 7.297 \times 10^{-3} \simeq \frac{1}{137} \tag{4-27b}$$

En la figura 4-19 se representan los primeros estados de energía del átomo de hidrógeno en términos de un diagrama de niveles de energía. La separación entre los diferentes niveles que tienen un valor de n común se ha exagerado muchísimo por razones de claridad. Las flechas indican las transiciones entre los diferentes estados de energía que producen las líneas del espectro atómico. Las líneas correspondientes a las transiciones representadas por flechas

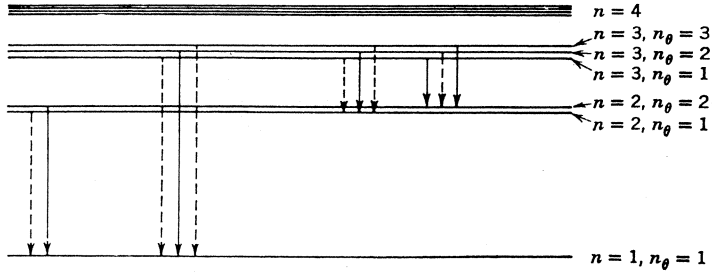


FIGURA 4-19

Desdoblamiento de estructura fina de algunos niveles de energía del átomo de hidrógeno. El desdoblamiento se ha exagerado muchísimo. Las flechas sólidas indican las transiciones que producen las líneas del espectro del hidrógeno observables.

continuas son las que se observan en el espectro del hidrógeno. Las longitudes de onda de estas líneas se ajustan muy bien con las predicciones derivadas de (4-27a).

Sin embargo, las líneas que corresponden a las transiciones representadas por flechas punteadas no se encuentran en el espectro. Es decir, las transiciones asociadas no ocurren. Una inspección a la figura demostrará que solamente ocurren las transiciones si

$$n_{\theta_i} - n_{\theta_f} = \pm 1 \tag{4-28}$$

A esta se la llama una *regla de selección*. Selecciona de todas las transiciones a aquellas que realmente ocurren.

4.11 El principio de correspondencia

A menudo es posible encontrar una justificación de las reglas de selección con la ayuda de un postulado auxiliar conocido como el *principio de correspondencia*. Este principio enunciado en 1923 por Bohr consiste de dos partes:

1. *Las predicciones de la teoría cuántica para el comportamiento de cualquier sistema físico deberán corresponder a las predicciones de la física clásica en el límite en el cual los números cuánticos que especifican el estado del sistema se hacen muy grandes.*

2. *Una regla de selección es cierta sobre todo el intervalo en el que existe el número cuántico. Por lo tanto cualesquiera reglas de selección que sean necesarias para obtener la correspondencia deseada en el límite clásico (n grades) también es aplicable en el límite cuántico (n pequeñas).*

En cuanto a la primera parte es obvio que la teoría cuántica debería corresponder con la teoría clásica en el límite en el cual el sistema se comporta clásicamente. La única pregunta es: ¿cuál es el límite clásico? La suposición de Bohr es que el límite clásico siempre se encuentra en el límite de los números cuánticos grandes. Para hacer esta suposición se guió por ciertas evidencias disponibles en su tiempo. Por ejemplo, la teoría clásica de Rayleigh-Jeans del espectro del cuerpo negro estaba de acuerdo con el experimento en el límite de ν pequeñas. Puesto que la teoría cuántica de Planck estaba de acuerdo con el experimento en cualquier región, se ve que la correspondencia entre las teorías clásica y cuántica se encuentra en este caso en el límite de las ν pequeñas. Pero es fácil ver que conforme ν se hace pequeña el valor promedio del número cuántico que especifica el estado de energía de las ondas electromagnéticas de frecuencia ν del cuerpo negro, se hace grande. (Ya que $\mathscr{E} = nh\nu$, se tiene $\overline{\mathscr{E}} = \bar{n}h\nu$. Pero cuando $\nu \to 0$, $\overline{\mathscr{E}} \to kT$, de modo que en este límite $\bar{n}h\nu = kT$, que es una constante. Entonces $\bar{n} \to \infty$ conforme $\nu \to 0$ en el límite clásico. Obsérvese también que si en la relación $\bar{n}h\nu = kT =$ constante, se fija ν y se toma $h \to 0$ como se hace frecuentemente al considerar el límite clásico, nuevamente se encuentra que $\bar{n} \to \infty$ en este límite). La segunda parte del principio de correspondencia fue simplemente una suposición, pero ciertamente muy razonable.

Ejemplificando el principio de correspondencia aplicándolo a un oscilador armónico simple, tal como un péndulo que oscila a la frecuencia ν. Una predicción de la teoría cuántica para este sistema es que los estados de energía permitidos están dados por $E = nh\nu$. En el análisis del capítulo 1, se vio que, en el límite de n grandes esta predicción concuerda con lo que se conoce acerca de los estados de energía de un péndulo clásico. En este caso, de un oscilador armónico simple, las teorías clásica y cuántica se corresponden para $n \to \infty$ en cuanto a lo que se refiere a los estados de energía. Supóngase enseguida que la masa del péndulo está cargada eléctricamente, de manera que se pueden comparar las predicciones de las dos teorías en lo tocante a la emisión y absorción de radiación electromagnética de este sistema. Clásicamente el sistema debería emitir radiación debido al movimiento acelerado de la carga y la frecuencia de la radiación emitida debería ser exactamente ν. De acuerdo con la física cuántica, la radiación se emite como resultado de que el sistema sufrió una transición del estado cuántico n_i al estado cuántico n_f. La energía emitida en esa transición es igual a $E_i - E_f = (n_i - n_f)h\nu$. Energía que

se emite en forma de un fotón de frecuencia $(E_i - E_f)/h = (n_i - n_f)\nu$. Por lo tanto, para obtener la correspondencia entre las predicciones clásica y cuántica sobre la frecuencia de la radiación emitida, es necesario que la regla de selección $n_i - n_f = 1$ sea válida en el límite clásico de n grandes. Un argumento similar referente a la absorción de radiación por el péndulo cargado demuestra que en el límite clásico también existe la posibilidad de una transición en la cual $n_i - n_f = -1$. La validez de estas reglas de selección en el límite cuántico de n pequeñas se puede probar investigando el espectro de la radiación emitida por una molécula diatómica vibrando. Los estados de energía vibracionales para ese sistema son justamente aquellos de un oscilador armónico simple, ya que la fuerza que los lleva a la separación de equilibrio de los dos átomos tienen la misma forma que la fuerza restauradora armónica. Del espectro vibracional se puede determinar que la regla de selección $n_i - n_f = \pm 1$ realmente funciona en el límite de números cuánticos pequeños, en concordancia con la segunda parte del principio de correspondencia.

De manera empírica y al analizar los espectros atómicos y moleculares se han descubierto otras reglas de selección. Algunas veces, pero no todas, ha sido posible entender estas reglas de selección en términos de argumentos basados en el principio de correspondencia.

Ejemplo 4-11. Aplicar el principio de correspondencia a la radiación del átomo de hidrógeno en el límite clásico.

La frecuencia de revolución ν_0 de un electrón en una órbita de Bohr se puede calcular a partir de (4-16) y (4-17) y está dada por

$$\nu_0 = \frac{v}{2\pi r} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3}\frac{2}{n^3}$$

Según la física clásica la frecuencia de la luz emitida en un caso como éste es igual a la frecuencia de revolución.

La física cuántica predice que la frecuencia ν de la luz emitida es, de (4-19)

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = c\kappa = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3}\left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right]$$

Pero si esta debe concordar con ν_0 se deberá tener $n_i - n_f = 1$, como una regla de selección para números cuánticos grandes. Para ver esto, tomemos $n_i - n_f = 1$ y se obtiene

$$\nu = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3}\left[\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2}\right] = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3}\left[\frac{2n-1}{(n-1)^2 n^2}\right]$$

donde $n_i = n$ y $n_f = n - 1$. Entonces, conforme $n \to \infty$ la expresión entre corchetes se aproxima a $2/n^3$ de modo que $\nu \to \nu_0$ cuando $n \to \infty$.

En la tabla 4-2 se ilustra la correspondencia para n grandes. ◀

Resulta instructivo observar que no obstante que ambas partes del principio de correspondencia conducen a un acuerdo con el experimento para el oscilador armónico simple, solamente la primera parte concuerda con el experimento para el caso del átomo de hidrógeno considerado en el ejemplo anterior. Los experimentos demuestran que la regla de selección $n_i - n_f = 1$, que fue necesaria para satisfacer la primera parte del principio para n grandes, no es aplicable al átomo de hidrógeno para n pequeñas. Ya que se observa que ocurren transiciones entre n bajas en las cuales la diferencia entre los números cuánticos es mayor que uno. Esto ejemplifica el hecho de que no siempre es posible hacer que la teoría cuántica antigua concuerde con la experimentación, sin embargo, esto tiene remedio.

TABLA 4-2. El principio de correspondencia para el Hidrógeno

n	ν_0	ν	% Diferencia
5	5.26×10^{13}	7.38×10^{13}	29
10	6.57×10^{12}	7.72×10^{12}	14
100	6.578×10^{9}	6.677×10^{9}	1.5
1,000	6.5779×10^{6}	6.5878×10^{6}	0.15
10,000	6.5779×10^{3}	6.5789×10^{3}	0.015

4.12 Una crítica a la teoría cuántica antigua

En los capítulos anteriores se han estudiado algunos de los pasos que condujeron a la mecánica cuántica moderna. En la actualidad a éstos se los denomina *teoría cuántica antigua.* En muchos conceptos esta teoría fue muy exitosa, más de lo que pueda parecerle al estudiante, ya que no se han mencionado un gran número de aplicaciones exitosas a fenómenos tales como la capacidad calorífica de los sólidos a baja temperatura que era inexplicable en términos de las teorías clásicas. Sin embargo, efectivamente la teoría cuántica antigua no está libre de crítica. Para completar el análisis de ella se deberá indicar algunos de sus aspectos débiles:

1. La teoría solamente establece la manera de tratar a los sistemas periódicos, utilizando las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld, pero existen muchos sistemas de interés físico que no son periódicos y el número de sistemas periódicos para los cuales es posible encontrar una base física de estas reglas a la manera de de Broglie, es muy pequeño.

2. No obstante que la teoría establece la manera de calcular las energías de los estados permitidos para ciertos sistemas y las frecuencias de los fotones emitidos o absorbidos cuando un sistema sufre una transición entre estados permitidos, no establece la manera de calcular las velocidades a las cuales ocurren tales transiciones. Por ejemplo no establece cómo calcular las intensidades de las líneas espectrales y ya se ha visto que tampoco cuáles transiciones realmente se observan y cuáles no.

3. Cuando se le aplica a los átomos la teoría tiene éxito solamente para átomos monoelectrónicos. Los elementos alcalinos (Li, Na, K, Rb, Cs), se pueden tratar aproximadamente pero sólo porque ellos son parecidos a un átomo monoelectrónico. La teoría falla bastante, aun cuando se la aplica al átomo de He neutro, el cual contiene sólo dos electrones.

4. Por último, se mencionará la crítica subjetiva de que la teoría como un todo parece algo falta de coherencia lo que la hace intelectualmente insatisfactoria.

Fue reconocido por todos los que en ello intervinieron, que algunas de estas objeciones eran realmente de una naturaleza muy fundamental y se invirtieron muchos esfuerzos intentando desarrollar una teoría cuántica que estuviera libre de estas y otras objeciones. El esfuerzo fue bien recompensado. En 1925 Erwing Schrödinger desarrolló su teoría de la *mecánica cuántica.* A pesar de ser una generalización del postulado de de Broglie, la teoría de Schrödinger es en algunos aspectos muy distinta de la teoría cuántica antigua. Por ejemplo, la descripción que de la estructura atómica proporciona la mecánica cuántica es la antítesis de la descripción de los electrones moviéndose en órbitas bien definidas tal como lo concebía la teoría cuántica antigua. No obstante, todavía se usa con frecuencia la teoría cuántica antigua como una primera aproximación de la descripción más precisa que proporciona la mecánica cuántica de los fenómenos cuánticos. Las razones son que la teoría cuántica antigua es casi capaz de dar resultados numéricamente correctos con procedimientos matemáticos que son considerablemente menos complicados que los que utiliza la mecánica cuántica y que la teoría cuántica antigua es sumamente útil en la visualización de los procesos que resultan muy difíciles de comprender en términos del lenguaje abstracto de la mecánica cuántica.

PREGUNTAS

1. En una colisión entre una partícula α y un electrón, ¿ qué consideración general es la que limita la transferencia de impulso? ¿El hecho de que la fuerza sea de Coulomb juega algún papel a este respecto?

2. ¿En qué difiere el modelo del átomo de Thomson de una distribución caótica de protones y electrones en una región esférica?

3. Hacer una lista de las objeciones al modelo de Thomson del átomo.

4. ¿Por qué se especificó que la laminilla es delgada en los experimentos tendientes a comprobar la fórmula de dispersión de Rutherford?

5. La dispersión de partículas α a ángulos muy pequeños no concuerda con la fórmula de Rutherford para esos ángulos. Explique.

6. ¿En qué difiere la deducción de (4-3), que da la trayectoria de una partícula que se mueve bajo la influencia de una fuerza de Coulomb repulsiva de la deducción de la trayectoria de un planeta que se mueve bajo la influencia del campo gravitacional del sol?

7. ¿Podría utilizarse una sección transversal diferencial de dispersión, definida como en (4-8), para describir la dispersión de partículas α a ángulos muy pequeños?

8. ¿Bohr postuló la cuantización de la energía? ¿Qué fue lo que postuló?

9. Para las órbitas del átomo de hidrógeno de Bohr la energía potencial es negativa y de magnitud mayor que la energía cinética. ¿Qué implica ésto?

10. Si sólo se necesitara calcular líneas en el espectro de obsorción del hidrógeno, ¿Cómo modificaría (4-19) para obtenerlas?

11. Al emitir un fotón, el átomo de hidrógeno, retrocede para conservar el impulso. Explicar el hecho de que la energía del fotón emitido es menor que la diferencia de energías entre los niveles involucrados en el proceso de emisión.

12. ¿Es posible que un átomo de hidrógeno absorba un fotón cuya energía exceda su energía de enlace, 13.6 eV?

13. ¿Es posible obtener un espectro de emisión continuo de un átomo de hidrógeno?

14. ¿Cuál es la energía mínima que debe tener un fotón para iniciar el efecto fotoeléctrico en hidrógeno gas? (¡Cuidado!).

15. ¿Esperaría Ud. observar todas las líneas del hidrógeno atómico si ese gas fuera excitado por electrones de energía 13.6 eV?

16. Suponga que la aniquilación electrón-positrón tiene lugar en el estado base del positronio. ¿Cómo afectará ésto las energías de los rayos del decaimiento bifotónico calculado en el capítulo 2, despreciando el sistema ligado?

17. ¿La energía de ionización del deuterio es diferente de la del hidrógeno? Explique.

18. ¿Por qué no está definida la estructura de la gráfica corriente contra el voltaje, en el experimento de Franck-Hertz, figura 4-14?

19. El pico de la figura 4-14 está justamente debajo de 10 eV. ¿Debido a dos excitaciones consecutivas del primer estado excitado del mercurio o a una excitación del segundo estado excitado?

20. ¿En qué otros ejemplos de la física clásica, aparte del movimiento planetario, se presenta la degeneración?

21. La constante de estructura fina α es adimensional y relaciona e, h y c, tres de las constantes fundamentales de la física. ¿Existe alguna otra combinación de estas tres constantes que sea adimencional? (Por supuesto, otras potencias diferentes a las que aparecen en la combinación).

22. ¿Cómo podría aplicarse el principio de correspondencia al diagrama fase de un oscilador lineal, figura 4-16?

23. Según la mecánica clásica, un electrón en un átomo debería ser capaz de moverse con un impulso angular cualesquiera. Según la teoría de Bohr del átomo de hidrógeno, el impulso angular está cuantizado a $L = nh/2\pi$. ¿El principio de correspondencia puede reconciliar estas dos afirmaciones?

PROBLEMAS

1. Demostrar, para un átomo de Thomson que un electrón moviéndose en una órbita circular estable gira con la misma frecuencia a la cual oscilaría en una oscilación a lo largo de un diámetro.

2. ¿Qué radio debería tener un átomo monoelectrónico en el modelo de Thomson si éste irradiara una línea espectral de longitud de onda $\lambda = 6000$ Å? Comente sus resultados.

3. (a) Una partícula α con velocidad inicial v choca con un electrón libre en reposo. Suponiendo que la masa de la partícula es alrededor de 7400 masas electrónicas, demostrar que la máxima deflexión de la partícula α es aproximadamente 10^{-4} rad. (b) Demostrar que la máxima deflexión de una partícula α que interacciona con la carga positiva de un átomo de Thomson de radio 1.0 Å también es aproximadamente 10^{-4} rad. De esto, argumente que $\theta \lesssim 10^{-4}$ rad para la dispersión de una partícula α por un átomo de Thomson.

4. Derivar (4-5) que relaciona la distancia de máximo acercamiento y el parámetro de impacto con el ángulo de dispersión.

5. Una partícula α de 5.30 MeV es dispersada 60° al pasar por una laminilla delgada de oro. Calcular (a) la distancia de máximo acercamiento D para una colisión frontal y (b) el parámetro de impacto b correspondiente a un ángulo de dispersión de 60°.

6. ¿Cuál es la distancia de máximo acercamiento a un núcleo de cobre para una partícula α de 5.30 MeV en una colisión frontal?

7. Demostrar que el número de partículas α dispersadas por un ángulo Θ o mayor en una dispersión de Rutherford es

$$\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \pi I \rho t \left(\frac{zZe^2}{Mv^2}\right)^2 \cot^2(\Theta/2)$$

8. La fracción de *protones* de 6.0 MeV dispersados del haz incidente en una región donde el ángulo de dispersión excede los 60° es igual a 2.0×10^{-5}. El material dispersor es una laminilla de oro delgada con densidad 19.3 g/cm³. Calcular el espesor de la hoja de oro utilizando los resultados del problema anterior.

9. Un haz de partículas α de energía cinética 5.30 MeV e intensidad 10^4 partículas/seg inciden normalmente sobre una laminilla de oro de densidad 19.3 g/cm³, 197 de peso atómico y espesor 1.0×10^{-5} cm. A una distancia de 10 cm de la hoja se coloca un contador de partículas α de área de 1.0 cm². Utilizando la sección transversal diferencial de dispersión de Rutherford (4-9), encontrar el número de conteos por hora para $\Theta = 10°$ y $\Theta = 45°$. donde Θ es el ángulo entre el haz incidente y una línea que va del centro de la laminilla al centro del contador. El número atómico del oro es 79.

10. En las mismas condiciones descritas en el problema anterior, se substituye la laminilla de oro por una de cobre de densidad 8.9 g/cm³, peso atómico 63.6 y espesor 1.0×10^{-5}. Cuando $\Theta = 10°$ se obtienen 820 conteos por hora. Encontrar el número atómico del cobre.

11. Demostrar que la constante de Planck tiene dimensiones de impulso angular.

12. Comparar la atracción gravitacional entre un electrón y un protón en el estado base de un átomo de hidrógeno con la atracción de Coulomb entre ellos mismos. ¿Está justificado el que se ignore la fuerza gravitacional?

13. Demostrar que la frecuencia de revolución del electrón en el átomo de hidrógeno del modelo de Bohr está dado por $v = 2|E|/hn$ donde E es la energía total del electrón.

14. Demostrar que para todas las órbitas de Bohr la razón del momento magnético dipolar de la órbita electrónica al impulso angular orbital tiene el mismo valor.

15. (a) Demostrar que la rapidez del electrón en el estado base del átomo de hidrógeno se puede escribir como $v = \alpha c$ donde α es la constante de estructura fina. (b) A partir del valor de α ¿qué se podría concluir acerca del hecho de ignorar los efectos relativistas en los cálculos de Bohr?

16. ¿Cuáles son la energía, el impulso y la longitud de onda de un fotón emitido por un átomo de hidrógeno que sufre una transición directa desde un estado excitado con $n = 10$ al estado base? Encontrar la rapidez de retroceso del átomo de hidrógeno en este proceso.

17. (a) Calcular, utilizando la fórmula de Bohr, las tres longitudes de onda más largas en la serie de Balmer. (b) ¿Cuáles son los límites en longitudes de onda de la serie de Balmer?

18. Calcular las longitudes de onda más cortas de la serie de Lyman, Paschen y Pfund para el hidrógeno. ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentra cada uno?

19. Según el modelo de Bohr, ¿Cuáles son: (a) el número cuántico, (b) el radio de la órbita, (c) el impulso angular, (d) el impulso lineal, (e) la velocidad angular, (f) la rapidez lineal, (g) la fuerza sobre el electrón, (h) la aceleración del electrón, (i) la energía cinética, (j) la energía potencial, y (k) la energía total para el estado base del átomo de hidrógeno? ¿Cómo varían las cantidades (b) y (k) con el número cuántico?

20. ¿Cuánta energía se requiere para quitar un electrón de un átomo de hidrógeno en un estado $n = 8$?

21. Se excita un átomo de hidrógeno desde un estado con $n = 1$ a uno con $n = 4$. (a) Calcular la energía que debe absorber el átomo. (b) Calcular y hacer un diagrama de niveles de energía de las distintas energías para los fotones que emitiría el átomo si regresara a su estado $n = 1$. (c) Calcular la rapidez de retroceso del átomo de hidrógeno, suponiéndolo inicialmente en reposo, cuando realiza la transición desde $n = 4$ hasta $n = 1$ en un solo salto cuántico.

22. Un átomo de hidrógeno en un estado con energía de enlace (energía necesaria para extraerle un electrón) de 0.85 eV realiza una transición a un estado con una energía de excitación (diferencia en energía entre el estado y el estado base) de 10.2 eV. (a) Encontrar la energía del fotón emitido. (b) Mostrar esta transición en un diagrama de niveles de energía para el hidrógeno, escribiendo los números cuánticos apropiados.

23. Sobre un diagrama de niveles de energía para el hidrógeno, mostrar los números cuánticos correspondientes a una transición en la cual la longitud de onda del fotón emitido es 1216 Å.

24. (a) Demostrar que cuando se toma en cuenta la energía cinética de retroceso del átomo, $p^2/2M$, la frecuencia de un fotón emitido en una transición entre dos niveles atómicos de diferencia de energía ΔE se reduce por un factor que es aproximadamente $(1 - \Delta E/2Mc^2)$.(Sugerencia: el impulso de retroceso es $p = h\nu/c$.) (b) Comparar la longitud de onda de la luz emitida cuando un átomo de hidrógeno sufre una transición $3 \rightarrow 1$, tomando en cuenta el retroceso y sin tomarlo en cuenta.

25. ¿Cuál es la longitud de onda del fotón con más energía que es capaz de emitir un átomo muónico con $Z = 1$?

26. Aplicar el modelo de Bohr a un átomo de helio ionizado, es decir, a un átomo de helio al cual se le ha quitado un electrón ¿Qué relaciones existen entre este espectro y el espectro del hidrógeno?

27. Calcular, utilizando el modelo de Bohr, la energía necesaria para arrancar el electrón al helio simplemente ionizado.

28. En un experimento del tipo del de Franck-Hertz se bombardea hidrógeno atómico con electrones y se encuentra que los potenciales de excitación se presentan para 10.12 V y 12-10 V; (a) explicar por qué se observa que a estas excitaciones se presentan tres líneas distintas del espectro de emisión. (Sugerencia: haga un diagrama de niveles de energía). (b) Suponga que las diferencias de energía se pueden expresar como $h\nu$ y encontrar los tres valores permitidos de ν. (c) Suponga que ν es la frecuencia de la radiación emitida y determine las longitudes de onda de las líneas espectrales observadas.

29. En un experimento de Franck y Hertz, suponga que la energía electromagnética emitida por un átomo de Hg, generada por la energía absorbida de electrones de 4.9 eV, es igual a $h\nu$, donde ν es la frecuencia que corresponde a la línea de resonancia del mercurio de 2536 Å. Calcular el valor de h según el experimento de Franck y Hertz y compararlo con el valor de Planck.

30. La radiación de un ion de helio He^+ es aproximadamente igual en longitud de onda a la línea H_α (primera línea de la serie de Balmer). (a) ¿Entre qué estados (valores de n) ocurre la transición en el ion de helio? (b) ¿La longitud de onda es mayor o menor que la de la línea H_α? (c) Calcular la diferencia de longitudes de onda.

31. En las estrellas en el espectro del He^+ se encuentra la serie de Pickering, que se emite cuando el electrón pasa desde niveles superiores al nivel $n = 4$. (a) Establecer la fórmula exacta para la longitud de onda de las líneas de esta serie. (b) ¿En qué región del espectro se encuentra esta serie? (c) Encontrar la longitud de onda del límite de la serie. (d) encontrar el potencial de ionización, en electronvolts, si el He^+ está en el estado base.

32. Supóngase que en un tubo que contiene hidrógeno ordinario es posible poner hidrógeno de número de masa tres (tritio) en cantidad suficiente como para realizar un examen espectroscópico. Determinar la separación de la línea normal del hidrógeno de la primera línea de la serie de Balmer que podría observarse. Expresar el resultado como una diferencia en longitud de onda.

33. Un tubo de descarga contiene los gases H^1, H^2, He^3, He^4, Li^6 y Li^7 atómicos e ionizados (el índice es la masa atómica), los últimos cuatro ionizados de manera que contienen solamente un electrón. (a) ¿Qué línea espectral aparecerá primero si el potencial a través del tubo se incrementa partiendo de cero. (b) Dar en orden creciente de frecuencia el origen de las líneas correspondientes a la primera línea de la serie de Lyman del H^1.

34. Considérese un cuerpo que gira libremente alrededor de un eje fijo. Aplicando las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld demuestre que los valores posibles de la energía total son

$$E = \hbar^2 n^2 / 2I \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

donde I es su inercia rotacional o momento de inercia alrededor del eje de rotación.

35. Suponga que el impulso angular de la tierra, cuya masa es de 6.0×10^{24} kg, debido a su movimiento alrededor del sol, con un radio de 1.5×10^{11} m, está cuantizado según la relación de Bohr $L = nh/2\pi$. ¿Cuál es el valor del número cuántico n? ¿Podría detectarse esta cuantización?

5

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

5.1 Introducción 159

Papel de la teoría de Schrödinger; limitaciones de los postulados de de Broglie; necesidad de la ecuación de onda diferencial.

5.2 Argumentos de plausibilidad que conducen a la ecuación de Schrödinger 162

Consistencia requerida con el postulado de de Broglie y la ecuación clásica de la energía; requisito de linealidad; supuesta solución **senoidal** para la partícula libre; fracaso de la solución real; éxito de la solución compleja; postulado de generalidad; relación con la teoría de Dirac; función de onda del oscilador armónico simple.

5.3 Interpretación de Born de las funciones de onda 169

Carácter complejo de las funciones de onda; funciones de onda como dispositivos de computación; densidades de probabilidad; postulado de Born; densidades de probabilidad clásica y cuántica del oscilador armónico simple; normalización; predicciones estadísticas de la mecánica cuántica.

5.4 Valores de expectación 176

Medidas repetidas y valor de expectación de la posición; valor de expectación de la posición del oscilador armónico simple; valor de expectación del impulso; operadores diferenciales; ecuaciones con operadores; asociaciones operador-variable; fórmula general para los valores de expectación; partícula en una caja.

5.5 La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo 187

Separación de variables; dependencia en el tiempo de las funciones de onda; discusión de la ecuación independiente del tiempo; eigenfunciones; argumento de plausibilidad para la ecuación independiente del tiempo.

5.6 Propiedades requeridas para las eigenfunciones 192

Finita, monovaluada y continuidad de las soluciones aceptables y sus primeras derivadas; justificación.

5.7 Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger 194

Propiedades geométricas de las soluciones a la ecuación diferencial; curvatura; dificultad con el caracter finito de las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo; energías totales discretas para las soluciones ligadas; continuo para las soluciones no ligadas; formas cualitativas de las eigenfunciones del oscilador armónico simple.

5.8 Resumen 203

Eigenvalores, eigenfunciones, funciones de onda, números cuánticos y estados cuánticos; solución general a la ecuación de Schrödinger; densidades de probabilidad estática u oscilante y emisión de radiación por átomos.

Preguntas 205

Problemas 207

5

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

5.1 Introducción

Se han presentado evidencias experimentales que demuestran de manera contundente que las partículas de sistemas microscópicos se mueven de acuerdo con las leyes del movimiento ondulatorio de algún tipo, y no de acuerdo con las leyes newtonianas que obedecen las partículas de los sistemas macroscópicos. Por lo tanto, una partícula microscópica actúa como si ciertos aspectos de su comportamiento estuviera gobernado por el comportamiento de una onda asociada de de Broglie o una función de onda. Los experimentos considerados sólo tratan con casos simples (tales como partículas libres u osciladores armónicos simples, etc.) que se pueden analizar con procedimientos sencillos (que involucran la aplicación directa del postulado de de Broglie, postulado de Planck, etc.). Pero ciertamente es deseable el estar preparado para tratar los casos más complicados que ocurren en la naturaleza ya que son importantes e interesantes. Para hacer esto se deberá tener un procedimiento más general que se pueda utilizar para tratar el comportamiento de las partículas de cualquier sistema microscópico. *La teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica* proporciona tal procedimiento.

Esta teoría especifica las leyes del movimiento ondulatorio que obedecen las partículas de cualquier sistema microscópico. Lo cual se hace especificando, para cada sistema, la ecuación que controla el comportamiento de la función de onda y especificando también la conexión entre el comportamiento de la función de onda y el comportamiento de la partícula. La teoría es una extensión del postulado de de Broglie. Más aún, existe una estrecha relación entre ella y la teoría de Newton del movimiento de partículas en sistemas macroscópicos. La teoría de Schrödinger es una generalización que incluye a la teoría de Newton como caso especial (en el límite macroscópico), de la misma manera que la teoría de Einstein de la relatividad es una generalización que incluye a la teoría de Newton como un caso especial (en el límite de velocidades bajas).

Se desarrollarán los puntos esenciales de la teoría de Schrödinger y se utilizarán para tratar un número de sistemas microscópicos importantes. Por ejemplo, se utilizará la teoría para obtener una comprensión detallada de las propiedades de los átomos, las cuales forman la base de gran parte de la química y de la física del estado sólido y que están íntimamente relacionados con las propiedades del núcleo.

Después de haber aplicado la teoría de Schrödinger a un número de casos el estudiante encontrará que empieza a desarrollar una intuición acerca del comportamiento de los sistemas mecánico-cuánticos, de la misma manera que desarrolló un sentimiento intuitivo para los sistemas clásicos provenientes de su estudio de la teoría de Newton y de las aplicaciones a cierto número de casos. Es posible hacer una comparación más realista entre la teoría de Schrödinger

y la teoría de Maxwell del electromagnetismo. La razón es que las ondas electromagnéticas se comportan de una manera completamente análoga a como lo hacen las funciones de onda de la teoría de Schrödinger. Cuando sea apropiada se utilizará esta analogía para demostrar la manera en la que están relacionados los resultados de la mecánica cuántica con los del electromagnetismo u otras formas del movimiento de las ondas clásicas que nos son más familiares. También se estudiarán muchos experimentos que confirmarán de manera directa los resultados que se obtendrán de la mecánica cuántica, de la misma manera como se han discutido muchos experimentos que sentaron las bases para la teoría. Pero el estudiante deberá ejercitar un poco la paciencia ya que hay mucho por hacer en el desarrollo de la teoría y trabajar sus consecuencias antes de que se puedan hacer comparaciones entre éstas y la experimentación.

Se ha visto que el postulado de de Broglie constituye un paso fundamental en el desarrollo de la teoría de Schrödinger del comportamiento de partículas microscópicas. Sin embargo, sólo es un paso. El postulado dice que el movimiento de una partícula microscópica está gobernado por la propagación de una onda asociada pero no dice cómo se propaga la onda. También predice de manera satisfactoria la longitud de onda que se infiere de las mediciones de los patrones de difracción observados en el movimiento de la partícula, pero solamente en los casos en los cuales la longitud de onda es esencialmente constante. Más aún, se contará con una relación cuantitativa entre las propiedades de la partícula y las propiedades de la función de onda que describe la onda. Esto es. se conocerá exactamente como la onda gobierna a la partícula.

En este capítulo se estudiará primero la ecuación, desarrollada por Erwin Schrödinger en 1925, que establece el comportamiento de cualquier función de onda de interés. A continuación se estudiará la relación desarrollada por Max Born en el año siguiente, que conecta el comportamiento de la función de onda con el comportamiento de la partícula asociada. Las soluciones detalladas a la ecuación de Schrödinger se reservan para los capítulos siguientes pero en este capítulo se verán sus soluciones en una forma general, así como la manera muy natural en la que conducen a la cuantización de la energía y otros fenómenos importantes.

Se pueden analizar algunos de los problemas concernientes con la aplicabilidad del postulado de de Broglie y también trazar algunas pistas acerca de lo que se tendrá que hacer para resolver los problemas considerando nuevamente el caso de una partícula libre. En el capítulo 3, cuando fue necesario utilizar una expresión matemática para una función de onda se utilizó una onda viajera senoidal como

$$\Psi(x,t) = \operatorname{sen} 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) \tag{5-1}$$

o cualquier función de onda formada por la suma de varias senoidales. La forma de (5-1) se obtuvo esencialmente de manera tentativa basándose en el hecho de que una partícula libre tiene un impulso lineal p de magnitud constante, puesto que no está actuada por ninguna fuerza, y por lo tanto tiene asociada una longitud de onda de de Broglie $\lambda = h/p$ de magnitud constante. La ecuación (5-1) es justamente la forma usual para una onda senoidal viajera de longitud de onda constante λ; que tiene también una frecuencia constante que se evaluará a partir de la relación de Einstein $\nu = E/h$, donde E es la energía total de la partícula asociada.

En el capítulo 4 fuimos capaces de extender el uso de una función de onda como la (5-1) al caso de una partícula que se mueve en una órbita circular de Bohr, imaginando a la onda senoidal como arrollada alrededor de la órbita. Pero esto fue posible solamente porque en una órbita circular de magnitud p, el impulso lineal permanece constante de modo que $\lambda = h/p$, la longitud de onda de de Broglie, también es constante a pesar de que la partícula es actuada por una fuerza .

No seremos capaces de hacer tales extensiones simples para tratar casos en los que el impulso lineal de la partícula cambia en magnitud y, por supuesto, estos casos son típicos de lo que sucede cuando una partícula está bajo la acción de una fuerza. El punto es que el postulado de de Broglie $\lambda = h/p$, establece que la longitud de onda λ cambia si cambia p; pero una longitud de onda no está lo suficientemente bien definida si cambia muy rápidamente. Esto se muestra con

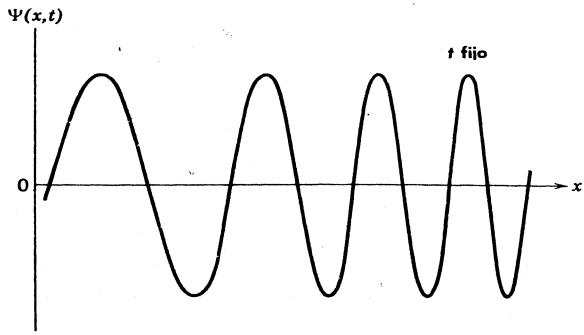


FIGURA 5-1

Onda no senoidal. Un análisis detenido mostrará que la separación entre un par de máximos adyacentes difiere de la separación entre mínimos adyacentes. Por lo tanto es difícil definir una longitud de onda aún para una sola oscilación.

la onda no senoidal de la figura 5-1. Aún para esta onda es difícil definir una longitud de onda variable ya que la separación entre máximos adyacentes no es igual a la separación entre mínimos adyacentes. Desde otro punto de vista, si el impulso lineal de una partícula no tiene magnitud constante debido a que la partícula está sujeta a la acción de una fuerza, se requieren funciones que son más complicadas que la senoidal de (5-1) para describir la onda asociada. Para encontrar estas funciones de onda más complicadas se necesitará ayuda.

La *ecuación de Schrödinger* proporcionará la ayuda necesaria. Esta es la ecuación que establece la forma de la función de onda $\Psi(x,t)$, si decimos la fuerza que actúa sobre la partícula asociada especificando la energía potencial que corresponde a dicha fuerza. En otras palabras, la función de onda es una solución a la ecuación de Schrödinger para esa energía potencial. El tipo más común de ecuación que tiene como solución a una función es una *ecuación diferencial.* De hecho, la ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial. Esto es, la ecuación es una relación entre su solución $\Psi(x,t)$ y ciertas derivadas de $\Psi(x,t)$ con respecto a las variables independientes de espacio y tiempo x y t. Como hay más de una variable independiente las derivadas deberán ser *derivadas parciales,* tales como

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} \quad \text{o} \quad \frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \quad \text{o} \quad \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} \quad \text{o} \quad \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial t^2} \tag{5-2}$$

Ejemplo 5-1. Evaluar las derivadas parciales listadas arriba para la función senoidal (5-1).

Una derivada parcial es una derivada de una función de varias variables independientes, que se evalúa permitiendo que una de las variables varíe mientras las otras se mantienen fijas. Esto se indica utilizando un símbolo tal como $\partial\Psi(x,t)/\partial x$ en vez del símbolo usual para la derivada ordinaria $d\Psi(x,t)/dx$. El símbolo significa, por ejemplo

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} \equiv \left[\frac{d\Psi(x,t)}{dx}\right]_{\text{Evaluada con } t \text{ constante}} \tag{5-3}$$

o

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \equiv \left[\frac{d\Psi(x,t)}{dt}\right]_{\text{Evaluada con } x \text{ constante}} \tag{5-4}$$

Antes de aplicar este procedimiento a la función senoidal (5-1) es conveniente volver a escribirla en términos de las cantidades $k = 2\pi/\lambda$ y $\omega = 2\pi\nu$. Se obtiene

$$\Psi(x, t) = \operatorname{sen} 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) = \operatorname{sen}(kx - \omega t)$$

La diferenciación parcial conduce a

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} &= \frac{\partial \operatorname{sen}(kx - \omega t)}{\partial x} = k \cos(kx - \omega t) \\
\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} &= k\frac{\partial \cos(kx - \omega t)}{\partial x} = -k^2 \operatorname{sen}(kx - \omega t) \\
\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} &= \frac{\partial \operatorname{sen}(kx - \omega t)}{\partial t} = -\omega \cos(kx - \omega t) \\
\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial t^2} &= -\omega\frac{\partial \cos(kx - \omega t)}{\partial t} = -\omega^2 \operatorname{sen}(kx - \omega t)
\end{aligned} \tag{5-5}$$

puesto que t se puede tratar como una constante en las dos primeras diferenciaciones, mientras que x se puede tratar como una constante en las dos últimas. En breve se probará que estos resultados son útiles. ◀

La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial parcial. En el contexto se estudiarán soluciones a esta ecuación y se verá que generalmente es muy fácil descomponerla en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (es decir, ecuaciones diferenciales que sólo involucran derivadas ordinarias). Estas ecuaciones diferenciales ordinarias serán manejadas entonces mediante la aplicación de técnicas directas. En todo este trabajo se supondrá que el estudiante no tiene conocimiento previo acerca de ecuaciones diferenciales de ningún tipo. Sólo se supondrá que sabe cómo diferenciar e integrar. Por supuesto que en conexión con su estudio de la mecánica clásica, es muy probable que el estudiante tenga alguna experiencia con ecuaciones diferenciales ordinarias. Probablemente tenga también una poca de experiencia con ecuaciones diferenciales parciales ya que la ecuación de Schrödinger es un miembro de la clase de las ecuaciones diferenciales parciales denominadas ecuaciones de onda, las cuales ocurren en muchos campos tanto de la física clásica como de la cuántica. Ejemplos que aparecen en la física clásica son las ecuaciones de onda para vibraciones en una cuerda tensa y la ecuación de onda para la radiación electromagnética. Se verá que la ecuación de onda en la mecánica cuántica tiene muchas propiedades en común con la ecuación de onda clásica y que también tiene algunas diferencias muy interesantes.

5.2 Argumentos de plausibilidad que conducen a la ecuación de Schrödinger

Ahora el primer problema que se presenta no es cómo resolver cierta ecuación diferencial; sino que el problema es cómo *encontrar* la ecuación. Esto es, se está en la posición de Newton cuando estaba buscando la ecuación diferencial

$$F = \frac{dp}{dt} = m\frac{d^2x}{dt^2} \tag{5-6}$$

que es la ecuación básica de la mecánica clásica, o de Maxwell cuando buscaba las ecuaciones diferenciales

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{5-7}$$

que forman la base del electromagnetismo clásico.

La ecuación de onda para una cuerda tensa se puede derivar de la ley de Newton y la ecuación de onda electromagnética se puede derivar de las ecuaciones de Maxwell; pero no se puede esperar ser capaces de derivar la ecuación de onda de la *mecánica cuántica* de ninguna de las ecuaciones de la *física clásica*. Sin embargo, se puede esperar alguna ayuda de los postulados de de Broglie-Einstein.

$$\lambda = h/p \quad \text{y} \quad \nu = E/h \tag{5-8}$$

que asocian la longitud de onda λ de la función de onda con el impulso lineal p de la partícula asociada y la frecuencia ν de la función de onda con la energía total E de la partícula, para el caso de una partícula con p y E esencialmente constantes. Esto es, se buscará que la ecuación de onda de la mecánica cuántica sea congruente con estos postulados y se utilizará este requisito de coincidencia en esta investigación. Las ecuaciones (5-8) más otras que se tendrán razones para aceptar, desembocarán en un argumento que está planeado para hacer que la ecuación de onda mecánico-cuántica parezca posible, pero deberá hacerse énfasis que este *argumento de plausibilidad* no constituye una derivación. En el análisis final, la ecuación de onda mecánico cuántica deberá obtenerse de un *postulado*, cuya justificación no es el que haya sido deducida por completo a partir de la información experimental ya conocida, sino que predice correctamente los resultados que se pueden verificar experimentalmente.

Se empezará este argumento de plausibilidad enlistando cuatro suposiciones razonables concernientes a las propiedades deseables de la ecuación de onda mecánico-cuántica:

1. Deberá ser coincidente con los postulados de de Broglie-Einstein. (5-8)

$$\lambda = h/p \quad \text{y} \quad \nu = E/h$$

2. Deberá ser coincidente con la ecuación

$$E = p^2/2m + V \tag{5-9}$$

que relaciona la energía total E de una partícula de masa m con su energía cinética $p^2/2m$ y su energía potencial V.

3. Deberá ser *lineal* en $\Psi(x,t)$. Esto es, si $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ son dos soluciones diferentes a la ecuación para una energía potencial dada V (se verá que las ecuaciones diferenciales parciales tienen muchas soluciones), entonces cualquier combinación lineal arbitraria de estas soluciones $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$, también es solución. Se dice que esta combinación es lineal ya que contiene la primera potencia (lineal) de $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$; se dice que es arbitraria ya que las constantes c_1 y c_2 pueden tener cualesquiera valores (arbitrarios). Este requisito de *linealidad* asegura que se podrá *sumar funciones de onda* para producir las interferencias constructivas y destructivas de las ondas. Los fenómenos de interferencia son comunes para las ondas electromagnéticas; todos los patrones de difracción de la óptica física se explican en términos de la adición de ondas electromagnéticas. Pero el experimento de Davisson-Germer muestra que los patrones de difracción también se encuentran en el movimiento de electrones y otras partículas. Por lo tanto, sus funciones de onda también presentan interferencias de manera que deberán ser susceptibles de sumarse.

4. La energía potencial V generalmente es una función de x y posiblemente de t. Sin embargo, existe un caso especial importante cuando

$$V(x,t) = V_0 \tag{5-10}$$

Que es justamente el caso de una partícula libre ya que la fuerza que actúa sobre la partícula está dada por

$$F = -\partial V(x,t)/\partial x$$

lo cual produce $F = 0$ si V_0 es una constante. En este caso la ley de Newton del movimiento afirma que el impulso lineal p de la partícula será constante y también se sabe que su energía

total E será constante. Aquí se tiene la situación de una partícula libre con valores constantes de $\lambda = h/p$ y $\nu = E/h$ que se discutió en el capítulo 3. Por lo tanto se supondrá que, en este caso, la ecuación diferencial deseada tendrá como soluciones ondas senoidales viajeras de longitud y frecuencia constantes, similares a la función de onda senoidal (5-1), considerada en este capítulo.

Utilizando las relaciones de de Broglie-Einstein de la suposición 1, para escribir la ecuación de energía de la suposición 2 en términos de λ y ν, se obtiene

$$h^2/2m\lambda^2 + V(x,t) = h\nu$$

Antes de continuar resulta conveniente introducir las cantidades

$$k = 2\pi/\lambda \qquad \text{y} \qquad \omega = 2\pi\nu \tag{5-11}$$

Como en el ejemplo 5-1, estas cantidades resultan útiles ya que eliminan las variables de los denominadores y porque "absorben" un factor de 2 que de otra manera aparecería siempre que se escribiera una función de onda senoidal. A la cantidad k se le denomina *número de onda* y a la cantidad, w *frecuencia angular*. Introduciéndolas se obtiene

$$\hbar^2k^2/2m + V(x,t) = \hbar\omega \tag{5-12}$$

donde

$$\hbar \equiv h/2\pi$$

es la constante de Planck dividida 2π. Para satisfacer las suposiciones 1 y 2 la ecuación de onda deberá de ser congruente con (5-12).

Para satisfacer la suposición de linealidad 3 es necesario que cada término en la ecuación diferencial sea lineal en $\Psi(x,t)$, es decir, sea proporcional a la primera potencia de $\Psi(x,t)$. Obsérvese que cualquier derivada de $\Psi(x,t)$ tiene esta propiedad. Por ejemplo, si se considera el cambio en la magnitud de $\partial^2\Psi(x,t)/\partial x^2$ que resulta de cambiar la magnitud de $\Psi(x,t)$, digamos por un factor c, se ve que la derivada aumenta por el mismo factor y por lo tanto es proporcional a la primera potencia de la función. Lo cual es cierto ya que

$$\frac{\partial^2[c\Psi(x,t)]}{\partial x^2} = c\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

donde c es cualquier constante. Para que la ecuación diferencial misma sea lineal en $\Psi(x,t)$, no deberá contener ningún término que sea independiente de $\Psi(x,t)$, es decir, que sea proporcional a $[\Psi(x,t)]^0$, o proporcional a $[\Psi(x,t)]^2$ o a cualquier potencia superior. Después de obtener la ecuación se demostrará explícitamente que ésta es lineal en $\Psi(x,t)$, y en este proceso será evidente la validez de estas aseveraciones.

A continuación se utilizará la suposición 4 que trata con la forma de la solución de la partícula libre; como se sugiere, primero se tratará de escribir una ecuación que contenga una función de onda senoidal (5-1) y/o derivadas de la función de onda. En el ejemplo 5-1 ya se han evaluado algunas de las derivadas. Observándolas se ve que el efecto de tomar la segunda derivada del espacio es introducir un factor $-k^2$ y el efecto de tomar la primera derivada en el tiempo es introducir un factor $-\omega$. Ya que se espera que la ecuación diferencial sea consistente con (5-12) que contiene un factor k^2 en un término y un factor ω en otro, se sugiere que la ecuación diferencial deberá contener una segunda derivada espacial de $\Psi(x,t)$ y una primera derivada temporal de $\Psi(x,t)$. Pero también deberá haber un término que contenga un factor de $V(x,t)$ ya que éste aparece en (5-12). Para asegurar la linealidad, este término deberá contener un factor de $\Psi(x,t)$. Uniendo todas estas ideas se intentará la siguiente forma para la ecuación diferencial

$$\alpha\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{5-13}$$

Las constantes α y β tienen valores a determinarse. Y se utilizan para dar la flexibilidad que, se supone, será necesaria para que (5.13) satisfaga los distintos requisitos.

En general la forma de (5-13) parece razonable, pero ¿funcionará en detalle? Para responderlo considere el caso de un potencial constante $V(x,t) = V_0$, y evalúe $\Psi(x,t)$ y sus derivadas a partir de (5-1) y (5-5), obteniéndose

$$-\alpha \operatorname{sen}(kx - \omega t)k^2 + \operatorname{sen}(kx - \omega t)V_0 = -\beta \cos(kx - \omega t)\omega \tag{5-14}$$

No obstante que las constantes α y β están a nuestra disposición, no es posible satisfacer (5-12) y las suposiciones 1 y 2 excepto para combinaciones especiales de las variables independientes x y t para las cuales sen $(kx - \omega t) = \cos(kx - \omega t)$. Es cierto que se podría obtener un acuerdo si α y β fueran constantes, pero esta posibilidad se ha descartado en favor de una mucho más simple que se presentará a continuación.

La dificultad surge debido a los cambios de cosenos en senos y viceversa provenientes de la diferenciación. Este hecho sugiere que para la función de onda de la partícula libre se utilice en vez de la senoidal simple (5-1), la combinación

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) \tag{5-15}$$

donde γ es una constante de valor indeterminado por el momento y que se introduce con el propósito de proporcionar una flexibilidad adicional. Se espera encontrar la mezcla apropiada de cosenos y senos que eliminen la dificultad. Evaluando las derivadas necesarias se obtiene

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} &= -k \operatorname{sen}(kx - \omega t) + k\gamma \cos(kx - \omega t) \\
\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} &= -k^2 \cos(kx - \omega t) - k^2\gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) \\
\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} &= \omega \operatorname{sen}(kx - \omega t) - \omega\gamma \cos(kx - \omega t)
\end{aligned} \tag{5-16}$$

Enseguida, substituyendo (5-15) y (5-16) en (5-13) que es la forma supuesta para la ecuación diferencial y haciendo $V(x, t) = V_0$ se obtiene

$$\begin{aligned}
-\alpha k^2 \cos(kx - \omega t) - \alpha k^2\gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) + V_0 \cos(kx - \omega t) \\
+ V_0\gamma \operatorname{sen}(kx - \omega t) = \beta\omega \operatorname{sen}(kx - \omega t) - \beta\omega\gamma \cos(kx - \omega t)
\end{aligned}$$

o

$$[-\alpha k^2 + V_0 + \beta\omega\gamma] \cos(kx - \omega t) + [-\alpha k^2\gamma + V_0\gamma - \beta\omega] \operatorname{sen}(kx - \omega t) = 0$$

Para que la última igualdad ocurra para todas las combinaciones posibles de las variables independientes x y t, es necesario que los coeficientes de los cosenos y de los senos sean cero. Entonces se obtiene

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta\gamma\omega \tag{5-17}$$

y

$$-\alpha k^2 + V_0 = \beta\omega/\gamma \tag{5-18}$$

Ahora se tiene un problema fácil de manejar; existen tres ecuaciones algebráicas que habrán de satisfacerse, (5-12), (5-17) y (5-18) pero se tienen a la disposición tres constantes libres α, β, y γ, Restando (5-18) de (5-17) se obtiene

$$0 = -\beta\gamma\omega - \beta\omega/\gamma$$

o

$$\gamma = -1/\gamma$$

de modo que,

$$\gamma^2 = -1$$

o

$$\gamma = \pm\sqrt{-1} \equiv \pm i \tag{5-19}$$

donde i es el *número imaginario* (ver apéndice E). Substituyendo este resultado en (5-17) se obtiene

$$-\alpha k^2 + V_0 = \mp i\beta\omega$$

que se puede comparar directamente con (5-12)

$$\hbar^2 k^2/2m + V_0 = \hbar\omega$$

para obtener

$$\alpha = -\hbar^2/2m \tag{5-20}$$

y

$$\mp i\beta = \hbar$$

o

$$\beta = \pm i\hbar \tag{5-21}$$

Existen dos posibilidades para el signo en (5-19) y resulta que no es importante la elección que se haga por lo que se seguirá la convención de escoger el signo más. Entonces (5-21) da $\beta = +i\hbar$ y con (5-20) se pueden evaluar todas las constantes que aparecen en la forma supuesta de la ecuación diferencial. Entonces (5-13) resulta en

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{5-22}$$

Esta ecuación diferencial satisface las cuatro suposiciones hechas para la ecuación de onda mecánico-cuántica.

Deberá hacerse énfasis en que se ha llegado a (5-22) tratando un caso especial: el caso de una partícula libre donde $V(x,t) = V_0$, es una constante. En este punto parece plausible argumentar que cabría esperar que la ecuación de onda mecánico-cuántica debería tener la misma forma que (5-22) en el caso general en el que la energía potencial $V(x, t)$ varía como una función de x y/ó t (es decir, donde la fuerza no es cero); pero no se puede probar que esto es cierto. Sin embargo, es posible *postularlo*. Se hace y por lo tanto se toma a (5-22) como la ecuación de onda mecánico-cuántica cuyas soluciones $\Psi(x,t)$ son las funciones de onda asociadas con el movimiento de una partícula de masa m que se encuentra bajo la influencia de fuerzas que están descritas por la función energía potencial $V(x, t)$. La validez del postulado habrá de juzgarse mediante la comparación de sus implicaciones con la experimentación y se harán muchas de ellas un poco después. La ecuación (5-22) fue obtenida por primera vez en 1926 por Erwin Schrödinger y por ello se le conoce como la *ecuación de Schrödinger*.

Schrödinger llegó a su ecuación mediante un argumento diferente a éste (y más esotérico). En la sección 5-4 se verán las ideas esenciales de su argumento. Sin embargo, él estuvo fuertemente influenciado en su trabajo por el postulado de de Broglie, como lo hemos estado nosotros en éste. Esto se puede ver en la cita siguiente, en la que el físico Debye describe las circunstancias en las que Schrödinger desarrolló su ecuación.

"Entonces de Broglie publicó su artículo. En este tiempo Schrödinger era mi sucesor en la Universidad de Zurich y yo estaba en la Universidad Técnica, que es un instituto federal, y tuvimos un coloquio juntos. Estuvimos hablando acerca de la teoría de de Broglie, coincidiendo en que no la entendíamos y que deberíamos pensar realmente sobre sus formulaciones y lo que significan. Invité a Schrödinger a que nos diera un coloquio sobre el tema y la preparación que realmente él hubiera obtenido. Existieron solamente unos cuantos meses entre su plática y sus publicaciones".

Cabe apuntar que no es posible esperar que la ecuación de Schrödinger sea válida cuando se aplica a partículas que se mueven a velocidades relativistas. Esto es así, ya que la ecuación fue diseñada para ser congruente con (5-9) que es la ecuación de la energía clásica y que es incorrecta para velocidades comparables con la velocidad de la luz. En 1928 Dirac desarrolló una teoría relativista de la mecánica cuántica utilizando esencialmente los mismos postulados de la teoría de Schrodinger, excepto que (5-9) se substituyó por su análogo relativista

$$E = \sqrt{c^2p^2 + (m_0c^2)^2} + V$$

Por supuesto que la teoría de Dirac se reduce a la teoría de Schrödinger en el límite de velocidades bajas. Debido a las complicaciones serias que introduce la raíz cuadrada de la ecuación relativista de la energía, no resulta apropiado introducir un tratamiento cuantitativo de la teoría de Dirac en este libro. Sin embargo algunos de los rasgos más interesantes de la teoría de Dirac se describirán cualitativamente en los siguientes capítulos en las ocasiones en las que se discutan los fenómenos cuánticos relativistas; ya se ha descrito uno de ellos: la producción de pares. Afortunadamente la mayoría de los fenómenos cuánticos interesantes se pueden estudiar en casos que no son relativistas.

Ejemplo 5-2. Verificar que la ecuación de Schrödinger es lineal en la función de onda $\Psi(x,t)$; es decir, que coincide con la suposición de linealidad 3.

Habrá de mostrarse que si $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ son dos soluciones a (5-22) para una $V(x, t)$ particular, entonces

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$$

también es una solución a esta ecuación, donde c_1 y c_2 son constantes de valor arbitrario, (5-22) igualada a cero se tiene la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi - i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0$$

A continuación se comprueba la validez de la combinación lineal substituyéndola en esta ecuación que supuestamente debe satisfacer. Se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(c_1\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + c_2\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2}\right) + V(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) - i\hbar\left(c_1\frac{\partial\Psi_1}{\partial t} + c_2\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right) = 0$$

que se puede reescribir como

$$c_1\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + V\Psi_1 - i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\right] + c_2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2} + V\Psi_2 - i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right] = 0$$

si realmente la combinación lineal es una solución a la ecuación de Schrödinger deberá satisfacerse la última igualdad. Esto es para todos los valores de c_1 y c_2 ya que la ecuación de Schrodinger afirma que cada uno de los paréntesis será igual a cero puesto que Ψ_1 y Ψ_2 son soluciones de la ecuación para la misma V.

Un razonamiento sencillo convencerá al estudiante que este resultado esencial no se obtendría si la ecuación de Schrödinger contuviera algún término que no fuera proporcional a la primera potencia de $\Psi(x,t)$. ◀

En los siguientes capítulos se resolverá en una forma metódica la ecuación de Schrödinger para un número de sistemas importantes y se obtendrán las funciones de onda que describen a los sistemas. Pero en este capítulo se utilizarán algunas de estas funciones de onda para ilustrar varias propiedades de la teoría de Schrödinger. Cuando se requiera, estas funciones de onda "se sacarán del sombrero". Sin embargo, se dará al estudiante confianza en su validez verificando que cada una es una solución a la ecuación de Schrödinger, para el sistema en cuestión, por el procedimiento simple de substituirla en la ecuación. Esto se hace en el ejemplo 5-3 para una función de onda que es particularmente útil para propósitos de ejemplificación.

Ejemplo 5-3. La función de onda $\Psi(x,t)$ para el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple, que consiste de una partícula de masa m actuada por una fuerza de restitución lineal con constante de fuerza C, se puede expresar como

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}\,t}$$

donde la constante real A puede tener cualquier valor. Verificar que esta expresión es una solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial apropiado. (El término dependiente del tiempo es una exponencial compleja; ver apéndice E).

La expresión se aplica al caso en el cual el punto de equilibrio del oscilador (el punto en el cual la partícula clásica estaría en reposo si no oscilara) está en el origen del eje x ($x=0$). En este caso, la energía potencial independiente del tiempo es

$$V(x,t) = V(x) = Cx^2/2$$

como puede verificarse observando que la fuerza correspondiente $F=-dV(x)/dx=-Cx$ es una fuerza de restitución lineal con constante de fuerza C. La ecuación de Schrödinger para este potencial es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{C}{2}x^2\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Para comprobar la validez de la solución propuesta se evalúan sus derivadas encontrándose

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi$$

y

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x}=-\frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar}2x\Psi=-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}x\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}x\left(-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}x\Psi\right)$$

$$=-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi+\frac{Cm}{\hbar^2}x^2\Psi$$

Que substituidas en la ecuación de Schrödinger dan

$$\frac{\hbar^2\sqrt{Cm}}{2m\hbar}\Psi-\frac{\hbar^2Cm}{2m\hbar^2}x^2\Psi+\frac{C}{2}x^2\Psi=i\hbar\left(-\frac{i}{2}\right)\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi$$

o

$$\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi-\frac{C}{2}x^2\Psi+\frac{C}{2}x^2\Psi=\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi$$

Y puesto que la última igualdad se satisface, la solución es válida.

En el siguiente capítulo se tratará la solución general a la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico simple. ◀

5.3 Interpretación de Born de las funciones de onda

Una propiedad muy importante e interesante de las funciones de onda se puede ver evaluando $\gamma = i$ en (5-15) que especifica la forma de las funciones de onda de la partícula libre, obteniéndose

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t) \tag{5-23}$$

la función de onda compleja; esto es, contiene al número imaginario i. Recordando que el comportamiento fue forzado por nosotros, tratemos primero de encontrar una forma de satisfacer las cuatro suposiciones concernientes a la ecuación de Schrödinger, utilizando una función de onda real para la partícula libre (5-1) y se encontrará que ésta no fue una forma razonable de hacerlo. Solamente se ha tenido éxito cuando se le permite a la función de onda de la partícula libre tener una parte imaginaria, utilizando la función de onda (5-15) en la cual se ha hecho γ igual a i. En este proceso también se ha terminado con una i en la ecuación de Schrödinger (5-22). Si el estudiante observa cuidadosamente el argumento de plausibilidad resultará evidente que la ecuación contiene una i debido a que ésta relaciona una *primera derivada en el tiempo* con una *segunda derivada en el espacio;* lo cual es debido al hecho de que la ecuación de Schrödinger está basada en la ecuación de la energía que relaciona la primera potencia de la energía total con la segunda potencia del impulso. La presencia de una i en la ecuación de Schrödinger implica que, en el caso general (para cualquier función energía potencial), las funciones de onda que son sus soluciones serán complejas. En breve se verá que esto es cierto.

Puesto que una función de onda de la mecánica cuántica es compleja especifica simultáneamente dos funciones reales, su parte *real* y su parte *imaginaria* (ver apéndice E). Esto está en contraste con una "función de onda de la mecánica clásica". Por ejemplo una onda en una cuerda se puede especificar mediante una función real que da el desplazamiento de varios elementos de la cuerda en varios instantes de tiempo. La función de onda clásica no es compleja debido a que la función de onda clásica no contiene una i, ya que ésta relaciona una segunda derivada en el tiempo con una segunda derivada en el espacio.

El hecho de que las funciones de onda sean funciones complejas no deberá considerarse como un punto débil de la teoría de la mecánica cuántica. En realidad este es un detalle deseable ya que de inmediato hace evidente que no se debería intentar dar a las funciones de onda una existencia física, en el mismo sentido que la tienen las ondas en el agua. La razón es que una cantidad compleja no se puede medir por ningún instrumento físicamente real. El mundo "real" (utilizando el término en su sentido no matemático) es el mundo de las cantidades "reales" (utilizando el término en su sentido matemático).

Por lo tanto, no se deberá responder, ni siquiera plantear la pregunta: ¿Qué es exactamente ondular y qué es lo que está ondulado? El estudiante recordará que consideraciones de preguntas como ésta, concernientes a la naturaleza de las ondas electromagnéticas, condujeron a los físicos del siglo XIX al concepto erróneo del éter. Como las funciones de onda son complejas, no existe la tentación de cometer otra vez el mismo error. Por el contrario, resulta evidente desde el principio que las *funciones de onda* son *dispositivos computacionales* que solamente tienen significado en el contexto de la teoría de Schrödinger de la cual forman parte. Estos comentarios, no deberán tomarse para implicar que las funciones de onda no tienen interés físico. En esta sección y en las siguientes se verá que una función de onda contiene en realidad toda la información que el principio de incertidumbre permite conocer acerca de la partícula asociada.

La conexión básica entre las propiedades de la función de onda $\Psi(x,t)$ y el comportamiento de la partícula asociada está expresada en términos de la *densidad de probabilidad* $P(x, t)$. Esta cantidad especifica la probabilidad, por unidad de longitud del eje x de encontrar a la partícula en la vecindad de la coordenada x al tiempo t. Según un *postulado,* enunciado inicialmente por Max Born en 1926, la relación entre la densidad de probabilidad y la función de onda es

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \tag{5-24}$$

donde el símbolo $\Psi^*(x,t)$, representa el *complejo conjugado* de $\Psi(x,t)$(ver apéndice E). Para aclarar y hacer énfasis se volverá a enunciar el postulado de Born como sigue:

Si en el instante t se realiza una medición para localizar a la partícula asociada con la función de onda $\Psi^*(x,t)$*entonces la probabilidad* $P(x, t)\,dx$ *de encontrar a la partícula en una coordenada entre* x *y* $x + dx$ *es igual a* $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx$.

La justificación del postulado se puede encontrar en las consideraciones siguientes. Puesto que el movimiento de una partícula está conectado con la propagación de una función de onda asociada (la conexión de de Broglie), estos dos entes deberán estar asociados en el espacio. Esto es, la partícula deberá estar en algún sitio en el que las ondas tengan una amplitud apreciable. Por lo tanto $P(x, t)$ deberá tener un valor apreciable donde $\Psi(x,t)$ tenga un valor apreciable. En la figura 5-2 se intenta ilustrar esquemáticamente la situación . Si la situación fuera distinta existirían serias dificultades con la teoría. Por ejemplo, si la partícula estuviera en el espacio separada de la onda, surgirían problemas relativistas debido al tiempo requerido para transmitir información necesaria para que los entes se sigan uno al otro. Puesto que la cantidad mensurable densidad de probabilidad $P(x, t)$ es real y no negativa, mientras que la función de onda $\Psi(x,t)$ $P(x, t)$ es compleja, obviamente no es posible igualar $P(x, t)$ con $\Psi(x,t)$. Sin embargo, puesto que $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ siempre es real y no negativa, Born no fue inconsistente al igualarla con $P(x, t)$.

Ejemplo 5-4. Demostrar que$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$es necesariamente real y positiva o cero.

Como cualquier función compleja, $\Psi(x,t)$, siempre se puede escribir

$$\Psi(x,t) = R(x,t) + iI(x,t) \tag{5-25a}$$

donde $R(x, t)$ e $I(x, t)$ son funciones reales denominadas, parte *real* e *imaginaria* respectivamente. El complejo conjugado de $\Psi(x,t)$ está definido como

$$\Psi^*(x,t) \equiv R(x,t) - iI(x,t) \tag{5-25b}$$

Multiplicando miembro a miembro se obtiene

$$\Psi^*\Psi = (R - iI)(R + iI)$$

o, puesto que

$$\Psi^*\Psi = R^2 - i^2I^2 = R^2 + I^2$$

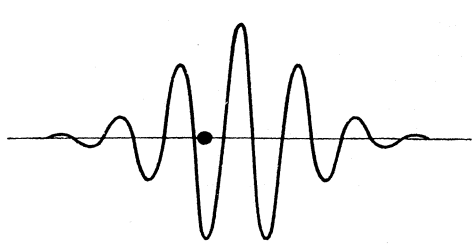


FIGURA 5-2

Descripción muy esquemática de una función de onda y su partícula asociada. La partícula deberá estar en algún lugar donde la función de onda tenga una amplitud apreciable.

Entonces,

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = [R(x,t)]^2 + [I(x,t)]^2 \tag{5-26}$$

Esto es, es igual a la suma de los cuadrados de dos funciones reales. Entonces $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ deberá ser real y positiva o cero. ◀

Por supuesto, existen otras funciones posibles que se pueden generar a partir de $\Psi(x,t)$ y que son reales. Un ejemplo es el valor absoluto o módulo $|\Psi(x,t)|$. Sin embargo, todas estas posibilidades se pueden eliminar mediante argumentos, muy largos para reproducirlos aquí, los cuales demuestran que ellas conducirían a un comportamiento no físico de $P(x, t)$.

Es importante para nosotros considerar nuevamente una analogía entre el electromagnetismo y la mecánica cuántica que se discutió en la sección 3-2. La conexión entre la densidad de fotones en un campo de radiación electromagnética y el cuadrado del vector del campo eléctrico es análoga a la conexión entre la densidad de probabilidad y la función de onda multiplicada por su complejo conjugado. Considérese, por ejemplo, que el vector de campo eléctrico es una solución a la ecuación de onda electromagnética mientras que la función de onda es una solución a la ecuación de onda mecánico-cuántica. Ambas cantidades especifican las amplitudes de las ondas, pero mientras que el vector eléctrico es real, la función de onda es compleja. Por lo tanto, el cuadrado de las ondas, $\mathscr{E}^2$, da la intensidad de las ondas en el caso electromagnético, mientras que es necesario tomar la amplitud multiplicada por su complejo conjugado, $\Psi^*\Psi$, para obtener una intensidad real en el caso mecánico-cuántico. En el caso electromagnético la intensidad de las ondas es proporcional a su densidad de energía. Puesto que en el campo electromagnético cada fotón lleva una energía $h\nu$, la densidad de energía es proporcional a la densidad de fotones. Para una dimensión es la probabilidad por unidad de longitud de encontrar a un fotón. En el caso mecánico-cuántico la intensidad de las ondas dan directamente la densidad de probabilidad que en una dimensión es la probabilidad por unidad de longitud de encontrar la partícula.

Ejemplo 5-5. Evaluar la densidad de probabilidad para la función del estado de menor energía del oscilador armónico simple del ejemplo 5-3.

La función de onda es

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}\,t}$$

Por tanto la densidad de probabilidad es (ver el apéndice E para la evaluación de Ψ^*)

$$P = \Psi^*\Psi = Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{+(i/2)\sqrt{C/m}\,t}Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}\,t}$$

o

$$P = A^2e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}$$

Obsérvese que la densidad de probabilidad es independiente del tiempo a pesar de que la función de onda depende del tiempo. Posteriormente se verá que esto es cierto en cualquier caso en el cual la partícula asociada con la función de onda está en un solo estado de energía. En la parte superior de la figura 5-3 se representa por la curva continua a la densidad de probabilidad P predicha por la mecánica cuántica. La probabilidad de que una medición de la localización de la partícula oscilante ocurra en un elemento del eje x entre x y $x + dx$ es igual a $P\,dx$.

Puesto que P tiene un máximo en $x = 0$, punto de equilibrio del oscilador, la mecánica cuántica predice que es más probable encontrar a la partícula en un elemento dx localizado en el punto de equilibrio. Alejándose en cualquier dirección de esta localización, la probabilidad de encontrar la partícula en un elemento de la misma longitud dx decrece muy rápidamente, pero no existen límites bien definidos más allá de los cuales la probabilidad de encontrar a la partícula en un elemento del eje x sea precisamente cero.

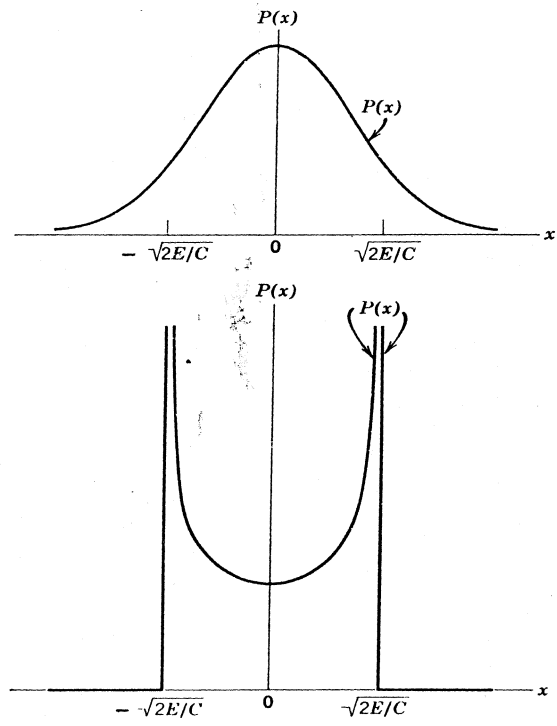


FIGURA 5-3

Arriba: Densidad de probabilidad mecánico-cuántica y *Abajo:* Densidad de probabilidad clásica. Ambas para una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple. La densidad de probabilidad mecánico-cuántica tiene sus picos cerca del punto de equilibrio y se extiende más allá de los límites del movimiento predicho por la física clásica. La densidad de probabilidad clásica es inversamente proporcional a la velocidad clásica y es mayor en los puntos extremos del movimiento, donde la velocidad se anula.

En el ejemplo siguiente se verá que estas predicciones son muy diferentes a las que se esperarían para la partícula oscilante según la mecánica clásica. ◀

Ejemplo 5-6. Evaluar las predicciones de la mecánica clásica para la densidad de probabilidad del oscilador armónico simple del ejemplo 5-5 y compararlas con las predicciones de la mecánica cuántica que se encontraron en ese ejemplo.

En la mecánica clásica la partícula oscilante tiene un impulso p definido y por lo tanto una velocidad v definida, para cualquier valor de su desplazamiento x medido desde la posición de equilibrio. La probabilidad de encontrarla en un elemento de longitud fijo sobre el eje x es proporcional al tiempo que la partícula invierte en ese elemento e inversamente proporcional a la velocidad con la cual pasa a través de él. Esto es

$$P = \frac{B^2}{v}$$

donde B^2 es alguna constante. Considerando la ecuación de la energía es fácil obtener una expresión para v en términos de x

$$E = K + V = \frac{mv^2}{2} + \frac{Cx^2}{2}$$

donde E, K y V son las energías total, cinética y potencial respectivamente y donde la energía potencial se ha evaluado en términos de x y de la constante de fuerza C del oscilador partiendo de una ecuación que se justificó en el ejemplo (5-3). Entonces se tiene

$$\frac{mv^2}{2} = E - \frac{Cx^2}{2}$$

o

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}}\sqrt{E - \frac{Cx^2}{2}}$$

De modo que

$$P = \frac{B^2}{\sqrt{\frac{2}{m}}\sqrt{E - \frac{Cx^2}{2}}}$$

Esta expresión para la densidad de probabilidad clásica P se representa por la curva de la parte baja de la figura 5-3. Esta curva tiene un valor mínimo en el punto de equilibrio x = 0 y crece rápidamente en la proximidad de los límites de la oscilación, los cuales ocurren para valores de x en los que la partícula no tiene energía cinética y por lo tanto la energía potencial es igual a su energía total

$$E = \frac{Cx^2}{2}$$

o

$$x = \pm\sqrt{\frac{2E}{C}}$$

Por supuesto, la densidad de probabilidad clásica cae bruscamente a cero fuera de los límites del movimiento de la partícula, lo cual se indica en la figura mediante las líneas rectas. De manera más simple, la probabilidad de encontrar a la partícula clásica oscilante en un elemento de longitud dada del eje x es menor en la proximidad del punto de equilibrio, región en la cual la partícula invierte menos tiempo, y crece rápidamente en la proximidad de los límites de su movimiento, en donde se demora.

El valor de la constante B^2 que aparece en la expresión para la densidad de probabilidad clásica, se puede determinar imponiendo el requisito de que la probabilidad total de encontrar a la partícula en *algún lugar* debe ser igual a uno. La probabilidad total es justamente la integral de P sobre todas las x, así que se puede utilizar la expresión

$$\int_{-\infty}^{\infty} P\,dx = \frac{B^2}{\sqrt{2/m}} \int_{-\sqrt{2E/C}}^{+\sqrt{2E/C}} \frac{dx}{\sqrt{E - Cx^2/2}} = 1$$

No nos molestaremos en desarrollar el llamado procedimiento de normalización para la densidad de probabilidad clásica, no obstante que no es difícil una vez que se ha expresado E en términos de C; pero se hará en el ejemplo 5-7 para determinar el valor de la constante A^2 correspondiente, que ocurre en la densidad de probabilidad mecánico-cuántica.

La figura 5-3 muestra que la predicción clásica para la densidad de probabilidad es muy diferente de la predicción de la mecánica cuántica. Según la mecánica clásica las mediciones de la localización de la partícula en el oscilador armónico simple lo encontrarán siempre dentro de dos límites bien definidos, los cuales por lo general se encontrarán cerca de uno o del otro de estos límites. Según la mecánica cuántica, cuando el oscilador armónico simple está en el estado de energía más bajo las mediciones encontrarán a la partícula por lo general cerca del punto de equilibrio, pero no existen límites bien definidos más allá de los cuales sea imposible encontrar la partícula.

Cuando el oscilador esté en su estado de energía más bajo, se estará muy lejos del intervalo de validez de la física clásica y por lo tanto, se espera que, de las dos predicciones, la hecha por la mecánica-cuántica sea correcta. Como se verá en el capítulo 12, esto se puede confirmar midiendo las propiedades de las moléculas diatómicas que dependen del espaciamiento interatómico, ya que en los estados de energía bajo los dos átomos de la molécula sienten la fuerza restauradora lineal característica del movimiento armónico simple. Por supuesto, el problema con el cálculo clásico es que éste ignora el principio de incertidumbre al asociar un valor definido a la velocidad o impulso de la partícula con un valor definido de su posición. En el

ejemplo 5-12 se hará una comparación entre las predicciones clásica y cuántica de la función densidad de probabilidad para una partícula en un estado de energía alto de un oscilador armónico simple, donde se está más próximo a la región de validez de la física clásica, ya que el principio de incertidumbre no es de consecuencias. Ahí se encontrará que las predicciones de las dos teorías son muy similares, como cabría esperar del principio de correspondencia. ◀

En el ejemplo 5-5 se vio una de las predicciones de la mecánica cuántica que concierne al comportamiento de una partícula en un oscilador armónico simple. La predicción es típica del tipo de información que puede proporcionar la teoría, la cual no puede decir que una partícula con un estado de energía dado se encontrará en una localización precisa a cierto tiempo, sino solamente las probabilidades relativas de que la partícula se encuentre en varias localizaciones es ese instante. Las predicciones de la mecánica cuántica son estadísticas.

El principio de incertidumbre provee la razón fundamental por la cual la mecánica cuántica misma se expresa en probabilidades y no en certidumbres. Por ejemplo, considérese que se investiga un oscilador armónico en algún estado de energía típico. Para conocer realmente que el sistema está en un estado particular se deberá hacer una medición de su energía. La medición necesariamente perturba al sistema en una forma que no se puede determinar por completo, de modo que no es sorprendente que no se pueda predecir con certeza dónde se encontrará la partícula cuando se haga la medición de la posición. En la mecánica clásica, a pesar de que la energía del sistema es microscópico, se puede hacer una medición de la energía además de otras mediciones sin perturbar al sistema. Así, la mecánica clásica afirma que se puede predecir con precisión si se desea, dónde se encontrará la partícula en una medición subsecuente. Pero cuando se aplica la mecánica clásica a un sistema microscópico es incorrecta. De la mecánica clásica no sólo es imposible predecir con precisión dónde estará una partícula de un sistema microscópico en una medición subsecuente, sino que como se vio en el ejemplo 5-6 también es imposible predecir con precisión las probabilidades relativas de encontrar a la partícula en varias localizaciones. La mecánica cuántica permite hacer predicciones precisas acerca de estas probabilidades relativas, debido a que toma en cuenta de manera cuantitativa el hecho fundamental de la vida del mundo microscópico: el principio de incertidumbre.

Born expresó la situación como sigue:

"Describimos el estado instantáneo del sistema por una cantidad Ψ, que satisface una ecuación diferencial y por lo tanto cambia con el tiempo, de una manera que está completamente determinada por su forma en el instante $t = 0$, por lo tanto su comportamiento es rigurosamente causal. Sin embargo, puesto que el significado físico se encuentra en la cantidad $\Psi^*\Psi$, y otras expresiones cuadráticas construidas de manera similar, las cuales Ψ, solamente define parcialmente, se sigue que, aun cuando las cantidades físicamente determinables se conocen completamente al tiempo $t = 0$, el valor inicial de la función Ψ está necesariamente indefinido. Esta visión de las cosas es equivalente a afirmar que los eventos suceden en realidad en una forma estrictamente causal, pero que nosotros no conocemos con exactitud el estado inicial. En este sentido la ley de causalidad es inútil; la física está en la naturaleza de lo indeterminado y por lo tanto sujeta a la estadística".

La primera observación que hace Born acerca de que la dependencia espacial de Ψ para algún instante inicial es suficiente para determinar completamente su dependencia espacial para cualquier instante posterior, es una consecuencia del hecho de que Ψ satisface la ecuación de Schrödinger la cual solamente contiene una primera derivada temporal.

Su segunda observación, acerca de la imposibilidad de definir completamente la dependencia espacial de la función de onda en el tiempo inicial se puede ver analizando (5-25a) (5-26) que muestra que si se conoce una densidad de probabilidad a partir de un conjunto inicial de mediciones sobre un sistema, no es posible determinar de manera unívoca una función de onda inicial asociada con el sistema. Todo lo que se puede determinar es la suma de los cuadrados de las partes real e imaginaria de la función de onda.

Las ideas de los últimos párrafos se pueden resumir diciendo que el comportamiento de una función de onda dada en un sistema, es predecible en el sentido de que la ecuación de

chrödinger para la energía potencial correspondiente determinará exactamente su forma ara algún instante posterior en términos de su forma en un instante inicial; *pero* su forma nicial no es posible determinarla completamente mediante un conjunto inicial de medidas y su orma final predice solamente las probabilidades relativas de los resultados del conjunto final de nedidas. Citando nuevamente a Born: "El movimiento de partículas se realiza conforme a las eyes de la probabilidad, pero la probabilidad misma se propaga de acuerdo con la ley de ;ausalidad".

Ejemplo 5-7. *Normalizar* **la función de onda del ejemplo 5-3 determinando el valor de la constante arbitraria** A **para el cual la probabilidad total de encontrar a la partícula asociada, en algún lugar sobre el eje** x**, es igual a uno.**

Si la partícula existe, la probabilidad total de encontrar a la partícula en *algún lugar* sobre todo el eje x es necesariamente igual a uno. Esta probabilidad total se puede obtener matemáticamente integrando la función densidad de probabilidad P sobre toda x. Haciendo esto e igualando el resultado a uno se obtiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} P\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi\,dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}\,dx = 1$$

Ya que el integrando $e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)\,x^2}$ depende de x^2 será una *función par de* x. Esto es, su valor para cierta x es igual a su valor *para* $-x$, tal como se puede ver en la figura 5-4. Por lo tanto la contribución al valor total de la integral que se obtiene en el intervalo $-\infty$ a 0 es igual a la contribución que se obtiene en el intervalo de 0 a $+\infty$, y se tiene

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}\,dx = 2A^2 \int_{0}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}\,dx = 1$$

La integral definida se puede evaluar consultando las tablas apropiadas y resulta en

$$\int_{0}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}\,dx = \frac{(\pi\hbar)^{1/2}}{2(Cm)^{1/4}}$$

Entonces inmediatamente se encuentra que el valor requerido para A *es*

$$A = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}$$

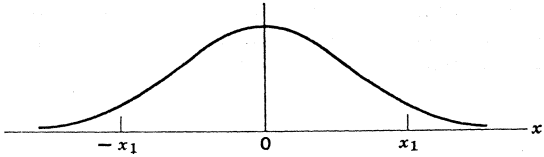
Con este valor de A la función de onda resulta

$$\Psi(x,t) = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}\, e^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}\, e^{-(i/2)\sqrt{C/m}\,t}$$

Al procedimiento seguido en el ejemplo 5-7 se le denomina *normalización* de una función de onda y se dice que la función de onda que aparece al final del ejemplo esta *normalizada*. Antes de

FIGURA 5-4

Gráfica de la función *par* $e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}$ Puesto que la función depende de x^2, su valor para cualquier x_1 particular, es igual a su valor para $-x_1$.



que se siga el procedimiento, la amplitud de la función de onda es arbitraria debido a que la linealidad de la ecuación de Schrödinger permite que una función de onda sea multiplicada por una constante de magnitud arbitraria y continúe siendo una solución a la ecuación. La normalización tiene el efecto de fijar la amplitud al fijar el valor de la constante multiplicativa, la A en el ejemplo 5-7. No siempre es necesario efectuar los cálculos para encontrar el valor de la constante de amplitud, debido a que es posible obtener resultados útiles en términos de las probabilidades relativas que son independientes de los valores específicos de las amplitudes. Pero siempre habrá de recordarse que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi\,dx = 1 \tag{5-27}$$

ya que estas integrales dan la probabilidad total de encontrar a la partícula descrita por la función de onda en alguna parte, y la probabilidad deberá ser igual a uno si la partícula existe.

5.4 Valores de expectación

En la sección anterior se vio que la función de onda contiene información acerca del comportamiento de la partícula asociada y que especifica la densidad de probabilidad para la partícula. En esta sección se verá la manera de extraer de la función de onda una amplia variedad de información adicional acerca de la partícula. Esto es, se aprenderá la manera de obtener información numérica detallada a partir de la función de onda y no solamente acerca de la posición de la partícula sino también acerca de su impulso, energía y todas las otras cantidades que caracterizan su comportamiento. Por ejemplo, se verá la manera de dar una evaluación cuantitativa de los términos Δx y Δp en el principio de incertidumbre. Las funciones de onda son útiles ya que contienen bastante información acerca del comportamiento de la partícula asociada.

Considérese a una partícula y a su función de onda asociada $\Psi(x,t)$. En una medición de la posición de la partícula en el sistema descrito por la función de onda, existirá una probabilidad finita de encontrarla en cualquier coordenada x en el intervalo de x a $x + dx$ siempre que la función de onda no sea cero en este intervalo. En general la función de onda no es cero sobre una región extensa del eje x, por lo tanto, generalmente no somos capaces de establecer que la coordenada x de la partícula tiene cierto valor definido. Sin embargo, es posible especificar algún tipo de posición *promedio* para la partícula de la manera siguiente: imagine que se hace una medición de la posición de la partícula en el instante t. La probabilidad de encontrarla entre x y $x + dx$, de acuerdo con el postulado de Born, (5-24)

$$P(x,t)\,dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx$$

Imagine que estas mediciones se realizan cierto número de veces sobre sistemas idénticos descritos por la misma función de onda $\Psi(x,t)$, y siempre para el mismo valor de t, registrando los valores de x en los cuales se encontró la partícula. Un ejemplo sería un conjunto de mediciones de las coordenas x de las partículas en los estados de menor energía de osciladores armónicos simples idénticos. En tres dimensiones, un ejemplo sería un conjunto de mediciones de las posiciones de los electrones en átomos de hidrógeno con todos los átomos en sus estados de menor energía. Se puede utilizar el promedio de los valores observados para caracterizar la posición de una partícula asociada con la función de onda $\Psi(x,t)$ para el tiempo t. Este valor promedio se le denominará *valor de expectación* de la coordenada x de la partícula al instante t. Es fácil ver que el valor de expectación de x, que se escribe $\bar{x}$ estará dado por

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)\,dx$$

La razón es que el integrando en esta expresión es justamente el valor de la coordenada x pesado por la probabilidad de observar dicho valor. Por lo tanto se obtiene integrando el promedio de los valores observados. Utilizando el postulado de Born para evaluar la densidad de probabilidad en términos de la función de onda, se obtiene

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t)\, dx \tag{5-28}$$

Los términos del integrando están escritos en el orden mostrado para preservar la simetría con una notación que se introducirá más tarde.

Algunos estudiantes encontrarán más familiares estas ecuaciones si se escriben en la forma

$$\bar{x} = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)\, dx}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)\, dx} = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t)\, dx}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\, dx}$$

pero son realmente equivalentes a la forma que se utilizó, ya que (5-27) muestra que los denominadores son iguales a uno.

Ejemplo 5-3. Determinar $\bar{x}$ para una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple, utilizando la función de onda y la densidad de probabilidad que se consideró en los ejemplos anteriores.

De las figuras 5-3 y 5-4 inmediatamente se ve que $\bar{x} = 0$. La razón es que $\bar{x}$ es el valor promedio de x, con el promedio calculado utilizando un factor de peso $\Psi^*\Psi$ que es simétrico alrededor de $x = 0$; para cualquier oportunidad de observar cierto valor positivo de x existe exactamente la misma oportunidad de observar un valor de x negativo de la misma magnitud. El comportamiento de la partícula en el oscilador es simétrico alrededor de su punto de equilibrio en $x = 0$, así $\bar{x} = 0$.

De manera más formal, se tiene

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi\, dx$$

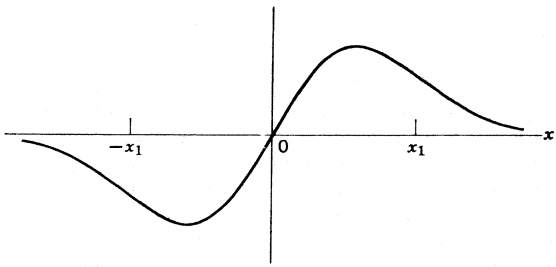


FIGURA 5-5

Gráfica de la función impar $xe^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}$. El valor de la función para cualquier x_1 particular es igual al negativo de su valor para $-x_1$.

donde el factor $\Psi^*\Psi$ en el integrando está representado en las figuras 5-3 y 5-4. Ahora, este factor es una función par de x y el factor restante en el integrando es x misma que es una función impar de x. Así, el integrando completo es una *función impar* de x. Esto es, su valor para una x particular es exactamente igual al negativo de su valor en $-x$ tal como se ilustra en la figura 5-5. De esto se sigue que la integral será cero ya que para cualquier contribución a su valor total, obtenida de un elemento del eje x en alguna x, existe una contribución del signo opuesto que la compensa, proveniente del elemento correspondiente en $-x$.

A partir de argumentos que utilizan un sistema coordenado en el cual el origen del eje x se escoge en el punto de equilibrio del oscilador, se conlcuye que $\bar{x}$ está en el punto de equilibrio, tal como se indica en la figura (5-6a); pero esta conclusión es cierta independientemente de la elección del origen. Esto es, si el punto de equilibrio del oscilador está localizado a la derecha del origen, $\Psi^*\Psi$ se encuentra centrada en la posición de equilibrio, de modo que $\bar{x}$ está localizada en tal punto, como se indica en la figura 5-6b. La razón es que el comportamiento del oscilador es simétrico alrededor de su punto de equilibrio. Si se perturba al oscilador haciendo que la fuerza de restitución sea más intensa en una dirección que en la otra, esta simetría se destruye. (Este ya no seguiría siendo un oscilador armónico simple). Por lo tanto $\Psi^*\Psi$ perderá su simetría y $\bar{x}$ se desplazará del punto de equilibrio. En las figuras (5-6c) y (5-6d) se muestran ejemplos. ◀

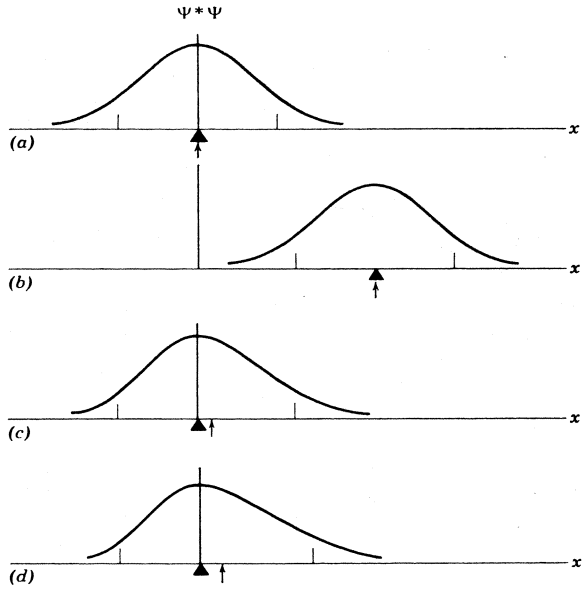


FIGURA 5-6

(*a*) Densidad de probabilidad para el estado base de un oscilador armónico cuyo punto de equilibrio (marcado por un triángulo) está en el origen. El valor de expectación $\bar{x}$ (marcado por una flecha) también está en el origen. (*b*) El oscilador está desplazado a lo largo del eje x, pero el valor de expectación $\bar{x}$ permanece coincidiendo con el punto de equilibrio. (*c*) La fuerza restauradora es más débil para desplazamientos positivos que para desplazamientos negativos, destruyendo la simetría del oscilador. Ahora es más probable encontrar a la partícula a la derecha que a la izquierda del punto de equilibrio, así que el valor de expectación $\bar{x}$ está ahora a la derecha del punto de equilibrio, pero éste se encuentra en el lugar en el que es más probable encontrar la partícula ya que en ese sitio la densidad de probabilidad es máxima. (*d*) Conforme la fuerza restauradora se hace más asimétrica, $\bar{x}$ está más desplazada a la derecha. En todas las figuras, las marquitas verticales sobre el eje x indican los límites de la oscilación clásica para el potencial apropiado, o para la fuerza y para la energía total.

Es evidente que una expresión de la misma forma que (5-28) sería apropiada para la evaluación del valor de expectación de cualquier función de x. Esto es

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) x^2 \Psi(x,t)\, dx$$

y

$$\overline{f(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) f(x) \Psi(x,t)\, dx$$

donde $f(x)$ es cualquier función de x. Aún para una función que puede depender explícitamente del tiempo, tal como una energía potencial $V(x, t)$, se puede escribir

$$\overline{V(x,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) V(x,t) \Psi(x,t)\, dx \tag{5-29}$$

ya que todas las mediciones hechas para evaluar $V(x,t)$ se hacen para el mismo valor de t y por lo tanto los argumentos anteriores siguen siendo válidos.

La coordenada x y la energía potencial $V(x, t)$ son dos ejemplos de las *cantidades dinámicas* que se pueden utilizar para caracterizar el comportamiento de la partícula. Ejemplos de otras cantidades dinámicas son el impulso p y la energía total E. Los valores de expectación de estas cantidades están dados siempre por el mismo tipo de expresión. Por ejemplo, el valor de expectación del impulso está dado por

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t)\, dx \tag{5-30}$$

Sin embargo, para evaluar la integral en (5-30) se deberá expresar el integrando $\Psi^*(x,t)p\Psi(x,t)$ como una función de las variables x y t. En la mecánica clásica siempre se puede escribir p como una función de las variables x y/o t. Por ejemplo, para una partícula que se mueve en un potencial independiente del tiempo, p se puede escribir como una función sólo de x ya que su impulso se conoce con precisión para cualquier punto de su trayectoria (después de haberse resuelto el problema). Una consideración momentánea sobre el comportamiento de un oscilador armónico simple clásico verificará esto. Pero en la mecánica cuántica el principio de incertidumbre establece que *no* es posible escribir p como una función de x, ya que p y x no pueden conocerse simultáneamente con completa precisión. Tampoco es posible escribir p como función de t. Se habrá de encontrar alguna otra forma de expresar el integrando de (5-30) en términos de x y t.

Se puede encontrar un indicio considerando la función de onda de la partícula libre (5-23) que es

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t)$$

Diferenciando respecto a x se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} &= -k \operatorname{sen}(kx - \omega t) + ik \cos(kx - \omega t) \\ &= ik[\cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t)] \end{aligned}$$

Y como $k = p/h$, entonces,

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i \frac{p}{h} \Psi(x,t)$$

que se puede escribir

$$p[\Psi(x,t)] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}[\Psi(x,t)]$$

Lo cual indica que existe una asociación entre la cantidad dinámica p y el *operador diferencial* $-i\hbar(\partial/\partial x)$. Esto es, el efecto de multiplicar la función $\Psi(x,t)$ por p es el mismo que el efecto de operar sobre ella con el operador diferencial $-i\hbar(\partial/\partial x)$ (esto es, tomar $-i\hbar$ veces la derivada parcial de la función respecto a x).

Se puede encontrar una asociación similar entre la cantidad dinámica E y el operador diferencial $i\hbar\,(\partial/\partial t)$ diferenciando la función de onda de la partícula libre $\Psi(x,t)$ respecto a t. Se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} &= +\omega \operatorname{sen}(kx - \omega t) - i\omega \cos(kx - \omega t) \\ &= -i\omega[\cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t)]\end{aligned}$$

Como $\omega = E/\hbar$, esto se puede escribir

$$E[\Psi(x,t)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}[\Psi(x,t)]$$

¿Estas relaciones están restringidas al caso de funciones de onda de partícula libre? ¡No! Considérese (5-9) que relaciona la energía total E con el impulso p y la energía potencial $V(x,t)$

$$\frac{p^2}{2m} + V(x,t) = E$$

Al substituir las cantidades dinámicas p y E por sus diferentes operadores diferenciales asociados, se tiene

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + V(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Y ya que $(-i\hbar)^2 = -\hbar^2$, y $(\partial/\partial x)^2 = (\partial/\partial x)(\partial/\partial x) = \partial^2/\partial x^2$, se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{5-31}$$

Que es una *ecuación de operadores*. Tiene significado cuando se la aplica a cualquier función de onda $\Psi(x,t)$, en el sentido de que se obtienen resultados idénticos después de efectuar las operaciones indicadas en cada uno de los lados de la ecuación. Es decir, (5-31) implica

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

donde $\Psi(x,t)$ es cualquier función de onda. Por supuesto, que esta es justamente la ecuación de Schrödinger. Por lo tanto, se concluye que postulando las asociaciones

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{y} \qquad E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{5-32}$$

es equivalente a postular la ecuación de Schrödinger. La validez de estas asociaciones es ilimitada.

El procedimiento utilizado en el último párrafo es esencialmente el original seguido por Schrodinger para obtener su ecuación. Este procedimiento proporciona un método poderoso para obtener la ecuación de onda mecánico-cuántica para casos más complicados que el de una sola partícula en una sola dimensión y que se trató en este capítulo. Posteriormente se utilizará este procedimiento para tratar los sistemas que interesan.

Utilizando la primera de estas asociaciones de operadores para obtener una expresión integrable para el valor de expectación del impulso. Tomando (5-30) que es

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t)\, dx$$

y sustituyendo p en el integrando por $-i\hbar(\partial/\partial x)$. Se obtiene

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)\, dx$$

o

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}\, dx \tag{5-33}$$

que es una expresión integrable de inmediato si se conoce $\Psi(x,t)$.

En este punto se puede ver la razón para ordenar los términos en los integrandos de (5-30) y (5-33). No tendría sentido tener

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial x}\, dx$$

como tampoco

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)]\, dx$$

$$= -i\hbar[\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)]_{-\infty}^{\infty}$$

ya que el miembro derecho de la última ecuación es siempre igual a cero. Esto es cierto ya que en cualquier situación real la partícula nunca se encontraría ni en $x = +\infty$ ó $x = -\infty$, y por lo tanto la densidad de probabilidad se anula en ambos límites. También debe mencionarse que utilizar la expresión

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t) \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x}\, dx$$

es equivalente a utilizar el signo menos en (5-19) lo cual no añade nada nuevo a la teoría..

El ordenamiento de los términos no es de consecuencia en los integrandos que ocurren en las expresiones para los valores de expectación de cantidades que son funciones de la posición y/o del tiempo, tales como (5-28) y (5-29) ya que no existen derivadas involucradas. Sin embargo, es una convención el utilizar el mismo orden que el requerido por las expresiones del valor de expectación del impulso.

La segunda de las expresiones de asociación de operadores (5-32) se puede evaluar utilizando el valor de expectación de la energía total E de una partícula en un estado descrito por la función de onda $\Psi(x,t)$, de la manera siguiente

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) E \Psi(x,t)\, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(x,t)\, dx \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}\, dx \cdot\end{aligned}$$

Pero obsérvese que también se puede utilizar la ecuación de la energía (5-9) para escribir E en términos de p y $V(x, t)$ y a continuación emplear la primera de las asociaciones (5-32) para convertir p en un operador, obteniéndose

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right)\Psi(x,t)\, dx$$

De hecho, el valor de expectación de cualquier cantidad dinámica se puede obtener utilizando sólo la primera de las asociaciones de operadores (5-32). Esto es, si *$f(x, p, t)$ es cualquier cantidad dinámica que es función de x, p y posiblemente de t, útil para describir el estado de movimiento de la partícula asociada con la función de onda $\Psi(x,t)$, entonces su valor de expectación $\overline{f(x,p,t)}$ está dado por*

$$\overline{f(x,p,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) f_{\text{op}}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right)\Psi(x,t)\, dx \qquad (5\text{-}34)$$

donde el operador $f_{\text{op}}(x, -i\hbar\,\partial/\partial x, t)$ se obtiene a partir de la función $f(x, p, t)$ simplemente substituyendo p por $-i\hbar\,\partial/\partial x$.

Se ha encontrado que la función de onda $\Psi(x,t)$ contiene más información que la sola densidad de probabilidad $P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$. La función de onda también contiene, a través de (5-34), el valor de expectación de la coordenada x, la energía potencial V, el impulso p, la energía total E y en general el valor de expectación de *cualquier* cantidad dinámica $f(x,p,t)$. De hecho, la función de onda contiene *toda* la información que el principio de incertidumbre proveé para conocer de la partícula asociada.

Ejemplo 5-9. Considere una partícula de masa m que se puede mover libremente a lo largo del eje x desde $x = -a/2$ hasta $x = +a/2$, pero que le está *estrictamente* prohibido encontrarse fuera de esta región. La partícula rebota hacia adelante y hacia atrás entre las paredes en $x = +a/2$ de una caja unidimensional. Se supone que las paredes son completamente impenetrables sin importar cuán energética sea la partícula. Por supuesto que esta suposición es una idealización pero que resulta sumamente útil. En el siguiente capítulo se estudiará este problema y se encontrará que la función de onda para el estado de energía más bajo es

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A\cos\dfrac{\pi x}{a}\, e^{-iEt/\hbar} & -a/2 < x < +a/2 \\ 0 & x \le -a/2 \text{ o } x \ge +a/2 \end{cases}$$

donde A es una constante real arbitraria y E es la energía total de la partícula. Esta función de onda es otra de las que resulta ilustrativo utilizar en este capítulo. Justificar su utilización verificando que es una solución a la ecuación de Schrödinger en la región $-a/2 < x < +a/2$, determinar el valor de E para el estado de energía más baja.

Si en la región en cuestión no hay fuerzas que actúen sobre la partícula, la función energía potencial será constante en la región. Como la energía potencial siempre está definida hasta una constante aditiva, se puede tomar como cero el valor de la energía potencial en la región. La ecuación de Schrödinger en la región es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad -a/2 < x < +a/2$$

Se verifica la función de onda substituyendo sus derivadas en la ecuación. Con

$$\Psi = A\cos\frac{\pi x}{a}e^{-iEt/\hbar}$$

se obtiene

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)A\,\text{sen}\frac{\pi x}{a}e^{-iEt/\hbar}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 A\cos\frac{\pi x}{a}e^{-iEt/\hbar} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\Psi$$

y

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}A\cos\frac{\pi x}{a}e^{-iEt/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

La substitución produce

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}\Psi = -i\hbar\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

o

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\Psi = E\Psi$$

Que se satisface idénticamente si E tiene el valor

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

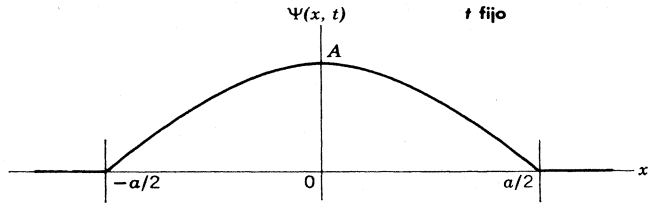


FIGURA 5-7

Dependencia en x de una función de onda para el estado de energía más bajo de una partícula confinada estrictamente a una región de longitud a pero que se mueve libremente en ella. En cualquier parte fuera de la región el valor de la función de onda es cero.

Entonces, se ha determinado el valor requerido para E que corresponde a la función de onda que nos interesa y también se ha verificado que la función de onda es la solución de la ecuación de Shrödinger

La figura 5-7 ilustra la función de onda mediante una gráfica de su dependencia espacial. Observe que los valores de $\Psi(x,t)$ en el interior de la caja ajustan con los valores externos (en el exterior de la caja) nulos en las fronteras de la región en $x = -a/2$ y $x = +a/2$ (paredes de la caja) debido a que la función coseno se aproxima a cero cuando x se aproxima a $\pm a/2$. Por supuesto que los valores externos de $\Psi(x,t)$ son cero debido a que la función de onda describe una partícula que tiene estrictamente prohibido el estar fuera de la región. ◀

Ejemplo 5-10. Utilice la función de onda de la "partícula en una caja" que se trató en el Ejemplo 5-9 para evaluar los valores de expectación de x, p, x^2 y p^2 para la partícula asociada con la función de onda.

Para evaluar x, deberá evaluarse

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx$$

Utilizando la función de onda del ejemplo 5-9 se tiene

$$\bar{x} = \int_{-a/2}^{+a/2} A \cos\frac{\pi x}{a} e^{+iEt/\hbar} x A \cos\frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} \, dx$$
$$= A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} x \cos^2\frac{\pi x}{a} \, dx$$

donde la integración se ha restringido a la región de $-a/2$ a $\pm a/2$ ya que $\Psi(x,t)$ es cero fuera de esta región. Ahora, observe que el integrando es un producto de $\cos^2(\pi x/a)$, que es una función par de x, multiplicando por x misma que es una función impar de x. Por lo tanto el integrando es una función impar de x. De esta conclusión se sigue que

$$\int_{-a/2}^{+a/2} x \cos^2\frac{\pi x}{a} \, dx = 0$$

ya que la integral de un integrando que es una función impar de la variable de integración, es cero si la integración se toma sobre un intervalo centrado alrededor de su origen (ver ejemplo 5-8). Entonces se obtiene

$$\bar{x} = 0$$

Una revisión somera mostrará por qué las mediciones de la localización de la partícula que se mueve libremente entre $-a/2$ y $+a/2$ deberá esperarse que se promedie a cero.

Para evaluar p se evalúa

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (-i\hbar) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \, dx$$

Utilizando la $\Psi(x,t)$, dada y su derivada respecto a x que se calculó en el ejemplo 5-9, se obtiene

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-a/2}^{+a/2} A \cos\frac{\pi x}{a} e^{+iEt/\hbar} \left(-\frac{\pi}{a}\right) A \operatorname{sen}\frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} \, dx$$

o

$$\bar{p} = i\hbar \frac{\pi}{a} A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a}\, dx$$

Nuevamente el integrando es, en total, una función impar de la variable de integración ya que es el producto de una función par cos $(\pi x/a)$ por una función impar sen $(\pi x/a)$. Entonces se obtiene

$$\bar{p} = 0$$

ya que la integral se toma sobre un intervalo centrado en el origen y consecuentemente resulta cero. Físicamente el valor de expectación del impulso de la partícula es cero ya que si la partícula está confinada a la región $-a/2$ y $+a/2$ *y se mueve con energía total* E deberá rebotar hacia adelante y hacia atrás entre los extremos de la región e invertir constantemente el signo (es decir, la dirección) de su impulso. Esto es, la magnitud de su impulso deberá ser tal que $p^2/em = E$, pero como es igualmente probable que el signo del impulso sea positivo o negativo, las mediciones de esta cantidad se promediarán a cero.

Para evaluar x_2, se deberá evaluar la integral

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x^2 \Psi\, dx = \int_{-a/2}^{+a/2} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{+iEt/\hbar} x^2 A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar}\, dx = A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a}\, dx$$

Que no se hace cero debido a que el ingregrando es una función par de x. Por la misma razón es posible, como en el ejemplo 5-7, simplificar de inmediato la integral para obtener

$$\overline{x^2} = 2A^2 \int_0^{+a/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a}\, dx$$

Si se multiplica y divide por y entre $(a/\pi)^3$, se puede escribir

$$\overline{x^2} = 2A^2 \left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \int_0^{+\pi/2} \left(\frac{\pi x}{a}\right)^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a}\, d\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Integral que se puede evaluar consultando las tablas apropiadas obteniéndose

$$\overline{x^2} = A^2 \frac{a^3}{4\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right)$$

Para determinar completamente x^2 se deberá también conocer el valor de la constante A que determina la amplitud de la función de onda. Como en el ejemplo 5-7, se puede encontrar el valor apropiado demandando la *normalización* de la función de onda. Esto es, ajustar A de modo que la probabilidad total de encontrar a la partícula en alguna parte es igual a uno. La condición produce

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi\, dx = A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a}\, dx = 2A^2 \frac{a}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a}\, d\left(\frac{\pi x}{a}\right) = 1$$

Integrando se obtiene

$$2A^2 \frac{a}{\pi} \frac{\pi}{4} = 1$$

o

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Entonces se tiene

$$\overline{x^2} = \frac{2}{a}\frac{a^3}{4\pi^2}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) = \frac{a^2}{2\pi^2}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) = 0.033a^2$$

La cantidad $\overline{x^2}$ no es cero a pesar de que $\bar{x} = 0$, debido a que cualquier medición de x^2 deberá conducir necesariamente a un resultado positivo. Esta cantidad o su raíz cuadrada $\sqrt{\overline{x^2}}$ (la raíz media cuadrada de la posición) se puede tomar como una medición de las fluctuaciones alrededor del promedio $x = 0$, que debería observarse en las determinaciones de la posición de la partícula. La última cantidad tiene el valor

$$\sqrt{\overline{x^2}} = 0.18a$$

Las fluctuaciones surgen debido a que la partícula no siempre se encuentra en el mismo sitio, si no en varios de ellos, ya que es posible encontrarla siempre que $\Psi^*\Psi$ tenga un valor apreciable. (En este caso en el que $\bar{x} = 0$, la cantidad $\sqrt{\overline{x^2}}$ es una medida de las fluctuaciones. Comentarios análogos son aplicables al impulso p). De la misma manera, en el caso en el que $x \neq 0$, la cantidad $\sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$ es una medida de las fluctuaciones.

Por último, evaluando p^2 de la expresión

$$p^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(-i\hbar)^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\, dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\, dx$$

Utilizando el valor de $\partial^2\Psi/\partial x^2$ calculado en el ejemplo 5-9, se tiene

$$\overline{p^2} = \hbar^2 \frac{\pi^2}{a^2} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi\, dx$$

Obviamente la integral es igual a uno, ya que esta es justamente la probabilidad de encontrar la partícula en algún sitio. Si estuvieramos interesados solamente en evaluar $\overline{p^2}$ no sería necesario realizar el proceso de normalización para evaluar A ya que se podría postular e inmediatamente concluir que

$$\overline{p^2} = \left(\frac{\hbar\pi}{a}\right)^2$$

La raíz cuadrada de esta cantidad (la raíz media cuadrática del impulso)

$$\sqrt{\overline{p^2}} = \frac{\hbar\pi}{a}$$

es una medida de las fluctuaciones alrededor del promedio, $\bar{p} = 0$, que debería observarse en la determinación del impulso de la partícula. Las fluctuaciones provienen, como se mencionó anteriormente, debido a que la partícula se encontrará en ocasiones con impulso $p = -\sqrt{2mE}$ en otras con impulso $p = +\sqrt{2mE}$. Si se calcula

$$p = \sqrt{2mE} = \sqrt{\frac{2m\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} = \frac{\pi\hbar}{a}$$

del ejemplo 5-9, se observa que $\sqrt{\overline{p^2}}$ es justamente igual a la magnitud de p.

Si se define $\sqrt{\overline{x^2}}$ y $\sqrt{\overline{p^2}}$ como las *incertidumbres* Δx y Δp en la posición y el impulso de la partícula en el estado de energía que se ha venido tratando, se obtiene

$$\Delta x\, \Delta p = \sqrt{\overline{x^2}}\sqrt{\overline{p^2}} = 0.18a\frac{\pi\hbar}{a} = 0.57\hbar$$

Que es en efecto consistente con el límite inferior $\hbar/2$ que establece el principio de incertidumbre. Obsérvese que esta es la primera vez que se ha hecho un cálculo cuantitativo al referirnos al principio de incertidumbre. Los valores de expectación calculados a partir de las funciones de onda hacen posible dar definiciones cuantitativas a las incertidumbres. ◀

5.5 La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

La utilidad de las funciones de onda justifica con mucho el trabajo requerido para obtenerlas. Esto se hace resolviendo la ecuación de Schrödinger (5-22)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

utilizando la función energía potencial $V(x, t)$ que describe con propiedad las fuerzas que actúan sobre la partícula que nos interesa. Ahora, se dará el primer paso para resolver esta ecuación diferencial parcial. Como se prometió, se desarrollará cuidadosamente los procesos matemáticos necesarios suponiendo que no existe conocimiento previo de las ecuaciones diferenciales por parte del estudiante.

La técnica usual para resolver ecuaciones diferenciales parciales consiste en buscar las soluciones en la forma de productos de funciones cada una de las cuales contiene sólo una de las variables independientes que aparecen en la ecuación. Esta técnica, llamada *separación de variables*, se utiliza debido a que de inmediato reduce la ecuación diferencial parcial a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias. Como se verá, esta es una simplificación considerable. Se está tratando aquí con una ecuación diferencial parcial que contiene una sola variable espacial x más la variable tiempo t. Entonces la técnica consiste en buscar soluciones en las cuales la función de onda $\Psi(x,t)$ se pueda escribir como el producto

$$\Psi(x,t) = \psi(x)q(t) \tag{5-35}$$

donde el primer término del segundo miembro es una función únicamente de x y el segundo lo es sólo de t. Se supondrá la existencia de soluciones de esta forma, se substituirá estas soluciones en la ecuación de Schrödinger que supuestamente satisfacen y se verá qué sucede. Si nuestra suposición no es válida, se sabrá de inmediato. Sin embargo, se encontrará que las soluciones de la forma supuesta realmente existen, *siempre que la energía potencial no dependa explícitamente del tiempo t*, de modo que la función se pueda escribir $V(x)$. Puesto que en la mecánica cuántica, así como en la clásica casi todos los sistemas tienen energías potenciales de esta forma, la condición no es una restricción muy seria.

La separación de variables conduce a la conclusión de que la función $\psi(x)$, que especifica la dependencia espacial de la función de onda $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$, es una solución a la ecuación diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

denominada la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. Obsérvese que esta ecuación es más simple que la ecuación de Schrödinger para la misma energía potencial debido a que sólo contiene una variable independiente x y por lo tanto es una ecuación diferencial ordinaria en

vez de una ecuación diferencial parcial. La técnica proporciona aun más información acerca de la función $\varphi(t)$ especificando la dependencia temporal de la función de onda. De hecho, se demostrará que $\varphi(t)$ satisface una ecuación diferencial ordinaria simple que se puede resolver de inmediato conduciendo a la expresión simple

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

donde E es la energía total de la partícula en el sistema. La separación de variables es una técnica tan útil que se empleará en varias ocasiones en lo que resta del libro. Ahora se desarrollarán los detalles de su aplicación a la ecuación de Schrödinger .

Substituyendo la forma supuesta para la solución $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$, en la ecuación de Schrödinger y restringiéndonos a las energías potenciales independientes del tiempo que se pueden escribir como $V(x)$, se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)\varphi(t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x)\varphi(t)}{\partial t}$$

Ahora

$$\frac{\partial^2\psi(x)\varphi(t)}{\partial x^2} = \varphi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = \varphi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

La notación $\partial^2\psi(x)/\partial x^2$ resulta redundante con $d^2\psi(x)/dx^2$ ya que $\psi(x)$ es una función sólo de x. Similarmente,

$$\frac{\partial\psi(x)\varphi(t)}{\partial t} = \psi(x)\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = \psi(x)\frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Por lo tanto, se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Dividiendo ambos miembros de esta ecuación entre $\psi(x)\varphi(t)$,se tiene

$$\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right] = i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} \tag{5-36}$$

Obsérvese que el segundo miembro de (5-36) no depende de x mientras que el primer miembro no depende de t; consecuentemente su valor común no puede depender ni de x ni de t. En otras palabras, el valor común deberá ser constante y se le denotará por G. El resultado de esta consideración es que (5-36) conduce a dos ecuaciones separadas. Una ecuación se obtiene haciendo el primer miembro igual al valor común

$$\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right] = G \tag{5-37}$$

La otra ecuación se obtiene haciendo el segundo miembro igual al valor común

$$i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} = G \tag{5-38}$$

A la constante G se le llama *constante de separación*, por la misma razón por la que a esta técnica para resolver ecuaciones diferenciales parciales se le llama separación de variables.

Retrospectivamente se ve que el efecto de emplear la técnica ha sido convertir la ecuación diferencial parcial simple que contiene dos variables independientes x y t en un par de ecuaciones diferenciales ordinarias, una que contiene solamente a x y la otra solamente a t. Estas ecuaciones están acopladas, en el sentido de que ambas contienen la misma constante de separación G, pero este tipo de acoplamiento no presenta ninguna dificultad para obtener las soluciones a las ecuaciones. Se encontrará que la ecuación temporal (5-38) tiene una solución muy simple. Además, cuando se exija que esta solución concuerde con el postulado de de Broglie-Einstein, se verá que el valor de la constante de separación G resulta determinada. Substituyendo este valor de G en la ecuación espacial (5-37) se obtiene una ecuación diferencial ordinaria cuyas soluciones se pueden obtener utilizando una de las muchas técnicas comunes que se han desarrollado para resolver esas ecuaciones. Lo que se ha hecho es reducir el problema de resolver la ecuación de Schrödinger diferencial parcial dependiente del espacio y del tiempo (5-22), al de resolver la ecuación diferencial ordinaria dependiente del espacio. El producto de la solución de esta ecuación y de la solución de la ecuación temporal es la solución deseada de la ecuación de Schrödinger.

Se puede ver que la forma del producto $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$, que se ha supuesto para la función de onda está justificada, ya que se podrá llevar a cabo el procedimiento descrito. También se verá que si la función energía potencial depende de x y de t no es posible efectuar la separación de (5-36) en el par de ecuaciones que se obtuvieron de ella. La razón es que no es posible separar términos de manera que un miembro de la ecuación no dependa de x a la vez que el otro sea independiente de t.

La ecuación temporal (5-38) es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden en φ como función de t. Existen varias técnicas disponibles para encontrar la solución a esas ecuaciones. Todas estas técnicas tienen un rasgo común: implican la suposición de una forma general para las soluciones, que al substituirla en la ecuación diferencial permite determinar, de la ecuación resultante, la forma específica requerida para la solución. Después de estudiar estas técnicas casi es posible desarrollar una intuición suficiente como para ser capaz de adivinar la forma específica de la solución en el primer intento, al menos para ecuaciones diferenciales simples. Este es un ahorro de tiempo y un procedimiento perfectamente legítimo, toda vez que la adivinanza se verifica substituyéndola en la ecuación diferencial y mostrando que la ecuación se satisface. Este es el procedimiento que usualmente se utilizará en este libro. Considérese (5-38) que una vez arreglada se puede escribir

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{iG}{\hbar}\varphi(t) \tag{5-39}$$

Esta ecuación diferencial establece que la función $\varphi(t)$, que es su solución, tiene la propiedad de que su primera derivada es proporcional a la función misma. Alguien con mucha experiencia en diferenciar no tendría dificultad en adivinar que $\varphi(t)$ deberá ser una función exponencial. Por lo tanto, suponga que la solución a la ecuación diferencial es de la forma

$$\varphi(t) = e^{\alpha t}$$

donde α es una constante que se determinará en breve. Verificando mediante diferenciación esta supuesta solución, se obtiene

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \alpha e^{\alpha t} = \alpha\varphi(t)$$

y a continuación se substituye en (5-39). Esto produce

$$\alpha\varphi(t) = -\frac{iG}{\hbar}\varphi(t)$$

Si se hace

$$\alpha = -\frac{iG}{\hbar}$$

la solución supuesta obviamente satisface la ecuación. Por lo tanto

$$\varphi(t) = e^{-iGt/\hbar} \tag{5-40}$$

es una solución a (5-38) o (5-39).

La solución $\varphi(t)$ se ha escrito en (5-40) con una exponencial compleja, pero se puede escribir como

$$\varphi(t) = e^{-iGt/\hbar} = \cos\frac{Gt}{\hbar} - i\,\text{sen}\frac{Gt}{\hbar} \tag{5-41a}$$

o

$$\varphi(t) = \cos 2\pi\frac{G}{h}t - i\,\text{sen}\,2\pi\frac{G}{h}t \tag{5-41b}$$

Se ve que $\varphi(t)$es una función oscilatoria en el tiempo, de frecuencia $\nu = G/h$. Pero según los postulados de de Broglie-Einstein (5-8), la frecuencia también deberá estar dada por $\nu = E/h$, donde E es la energía total de la partícula asociada con la función de onda correspondiente a $\varphi(t)$. Por supuesto que la razón es que $\varphi(t)$es la función que especifica la dependencia temporal de la función de onda. Comparando estas expresiones se ve que la constante de separación deberá ser igual a la energía total de la partícula. Esto es

$$G = E \tag{5-42}$$

Utilizando este valor de G en la ecuación espacial (5-37) que se obtuvo de la separación de variables, se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{5-43}$$

Usando este valor de G en la solución (5-40) de la ecuación temporal, de modo que se complete la especificación de $\varphi(t)$, la forma de producto de la función de onda resulta

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \tag{5-44}$$

donde E es la energía total de la partícula.

A la ecuación (5-43) se le llama la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, ya que la variable t no interviene en la ecuación. Sus soluciones $\psi(x)$ independientes del tiempo determinan, a través de (5-44) la dependencia espacial de las soluciones $\Psi(x, t)$de la ecuación de Schrödinger. Para los casos unidimensionales que se han tratado en este capítulo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo solamente puede contener una variable independiente x y por lo tanto será una ecuación diferencial ordinaria. Sin embargo, si hay más dimensiones espaciales, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo contendrá más variables independientes y por tanto será una ecuación diferencial parcial. (Usualmente se pueden reducir a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias mediante la aplicación de la técnica de separación de variables).

En todos los casos, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo no contiene al número imaginario i y por lo tanto sus soluciones $\psi(x)$ no necesariamente serán funciones complejas. (Es decir, $\psi(x)$ no necesariamente es compleja, pero puede serlo si así conviene). Esta

ecuación y sus soluciones son esencialmente idénticas a las ecuaciones diferenciales independientes del tiempo para el movimiento ondulatorio clásico y sus soluciones.

Las funciones $\psi(x)$ se llaman *eigenfunciones*. La primera parte *eigen* es la palabra alemana para característica. Posteriormente se tendrá una idea más clara de por qué característico es un vocablo apropiado. Aquí será suficiente decir que su uso es convencional. También es convencional el no traducirlo al inglés o al español, probablemente en honor al papel tan preponderante que tuvieron en el desarrollo de la mecánica cuántica los físicos de habla alemana.

El estudiante deberá ser muy cuidadoso en mantener claramente la diferencia entre las eigenfunciones $\psi(x)$ y las funciones de onda $\Psi(x,t)$, así como la diferencia entre la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la ecuación de Schrödinger misma. Las funciones de onda siempre se respresentarán por una letra Ψ mayúscula, y las eigenfunciones por la letra ψ minúscula.

Ejemplo 5-11. Desarrollar un argumento de plausibilidad similar al dado en la sección 5-2, que conduzca directamente a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Suponga que la ecuación debe concordar con la ecuación clásica de la energía

$$\frac{p^2}{2m} + V = E$$

y también con el postulado de de Broglie

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

Esas dos relaciones combinadas producen

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = E$$

o

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$$

A continuación se supone que la dependencia espacial de la función de onda para una partícula libre está dada por la expresión

$$\psi(x) = \operatorname{sen}\frac{2\pi x}{\lambda} = \operatorname{sen} kx$$

El número de onda k es constante ya que la energía potencial V es constante para el caso de una partícula libre y ya que la energía total también es constante. Diferenciando dos veces $\psi(x)$ con respecto a su única variable independiente, se obtiene

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -k \cos kx$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2 \operatorname{sen} kx = -k^2\psi(x)$$

ya que k es una constante. Ahora se substituye k^2 por el valor encontrado arriba y se obtiene

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi(x)$$

o

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, pero se ha obtenido de un argumento específico para el caso de una partícula libre en el que V es una constante. Si se postula, como en la sección 5-2, que la ecuación es válida aún en el caso general en el que $V = V(x)$ se obtiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula actuada por una fuerza.

En el texto se ha seguido un camino muy largo para obtener la misma ecuación, pero por supuesto que se ha aprendido mucho a lo largo del camino y que no está contenido en la ecuación de Schrödinger independientemente del tiempo. Por ejemplo, se sabe de la dependencia temporal de la función de onda $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, que es responsable del carácter necesariamente complejo y de muchas consecuencias que de esto resulta. ◀

5.6 Propiedades requeridas para las eigenfunciones

En la siguiente sección se considerará de manera muy general el problema de encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Estas consideraciones mostrarán que la cuantización de la energía aparece de manera muy general en la teoría de Schrödinger. Se verá que esta propiedad extremadamente importante resulta del hecho de que solamente es posible encontrar *soluciones aceptables* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para ciertos valores de la energía total E.

Para que una solución sea aceptable, se requiere que una eigenfunción $\psi(x)$ y su derivada $d\psi(x)/dx$ tengan las siguientes propiedades:

$\psi(x)$ debe ser *finita*	$d\psi(x)/dx$ debe ser *finita*
$\psi(x)$ debe ser *monovaluada*	$d\psi(x)/dx$ debe ser *monovaluada*
$\psi(x)$ debe ser *continua*	$d\psi(x)/dx$ debe ser *continua*

Estos requisitos se imponen para asegurar que la eigenfunción sea una función matemáticamente "bien comportada" con objeto de que las cantidades mensurables que se pueden evaluar a partir de la eigenfunción sean también bien comportadas. La figura 5-8 ilustra el significado de estas propiedades representando funciones que no son finitas, no monovaluadas o no continuas, en el punto x_0.

Si $\psi(x)$ o $d\psi(x)/dx$ no fuera finita o no fuera monovaluada, entonces lo mismo sería cierto para $\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$ o $\partial\Psi(x,t)/\partial x = e^{-iEt/\hbar}\, d\psi(x)/dx$. Ya que la fórmula general (5-34) para calcular los valores de expectación de la posición o el impulso contiene $\Psi(x,t)$ y $\partial\Psi(x,t)/\partial x$, se ve que en cualesquiera de los casos *no se obtendrían valores finitos y definidos cuando se evaluaran cantidades mensurables*. Esto sería completamente inaceptable debido a que las cantidades mensurables, como el valor de expectación de la posición $\bar{x}$ o del impulso p no se comportan de manera irrazonable. (En circunstancias muy raras, con las que no nos encontraremos, $\psi(x)$ puede irse a infinito en un punto, siempre que lo haga lo suficientemente lento como para mantener finita la integral de $\psi^*(x)\psi(x)$ sobre una región que contenga al punto en cuestión).

Para que $d\psi(x)/dx$ sea finita, es necesario que $\psi(x)$ sea continua. La razón es que cualquier función tiene siempre una primera derivada infinita si tiene una discontinuidad. La necesidad de que $d\psi(x)/dx$ sea continua se puede demostrar considerando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que se escribió como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$

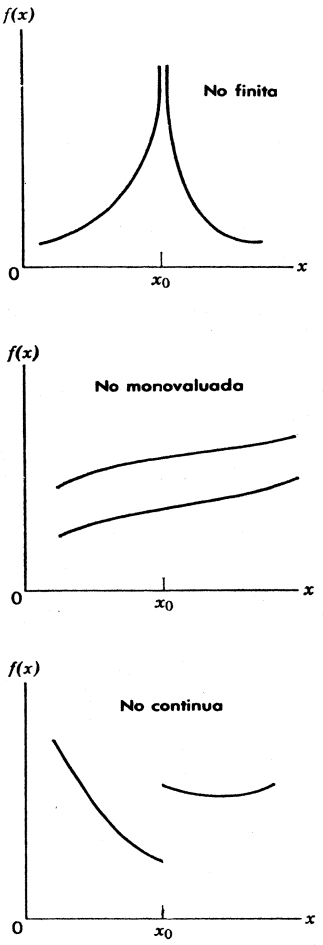


FIGURA 5-8

Ilustración de funciones que no son finitas, o monovaluadas, o continuas, en un punto x_0.

Para $V(x)$, E y $\psi(x)$, finitas se ve que $d^2\psi(x)/dx^2$ debe ser finita. Esto exige que $d\psi(x)/dx$ sea continua ya que cualquier función que tiene una discontinuidad en la primera derivada tendrá una segunda derivada infinita en ese punto. (Observe que existen discontinuidades en la primera derivada de la eigenfunción para la partícula en una caja que se consideró en el ejemplo 5-9. Estas ocurren en las paredes de la caja y provienen del hecho de que el sistema es una idealización en la cual se supone que las paredes son completamente impenetrables sin importar qué tan alta sea la energía de la partícula. Esto es, se supone que la energía potencial se hace infinita en las paredes. Esto se discute bastante en el capítulo siguiente).

La importancia de estos requisitos sobre las propiedades de soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo no se pueden exagerar. Las ecuaciones diferenciales tienen una amplia variedad de soluciones posibles y sólo cuando se selecciona de todas las posibles soluciones aquellas que satisfacen estos requerimientos es que se obtiene la cuantización de la energía u otras propiedades igualmente importantes de la teoría de Schrödinger y que se tratarán en el capítulo siguiente. Los requisitos de finitud y continuidad se utilizarán de inmediato; el que sea monovaluada se utilizará después pero es igualmente importante.

5.7 Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger

Es educativo estudiar el problema de obtener soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con argumentos cualitativos que manejen las curvaturas y pendientes de las curvas que se obtienen al graficar la solución. Como se verá, estos argumentos son muy generales y muy simples. Estos nos pueden enseñar muchas propiedades importantes de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, evitando así argumentos que implican matemáticas. De hecho, el punto de vista que se utilizará aquí es muy útil para hacer una investigación preliminar de las propiedades de casi cualquier ecuación diferencial y también proporciona una comprensión intuitiva del comportamiento de estas ecuaciones.

De estos argumentos solamente se obtendrán conclusiones cualitativas pero que serán muy valiosas; en los siguientes capítulos se encontrará un número de soluciones cuantitativas para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para varios potenciales. Estas soluciones se obtendrán a partir de técnicas analíticas comunes para resolver ecuaciones diferenciales. También en el apéndice F se encontrará una solución cuantitativa a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Esta solución se obtiene utilizando una técnica numérica que está basada en las mismas ideas utilizadas en los argumentos cualitativos de esta sección y así el estudiante deseará leer el apéndice después de leer esta misma.

Se comenzará con los argumentos, escribiendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi \tag{5-45}$$

Las propiedades de esta ecuación diferencial dependen, entre otras cosas, de la forma de la función energía potencial $V(x)$, lo cual es así ya que $V(x)$ determina la fuerza que actúa sobre la partícula cuyo comportamiento se supone describe las soluciones a la ecuación diferencial. En consecuencia, no se puede decir mucho acerca de las propiedades de la ecuación diferencial, hasta que no se diga algo acerca de $V(x)$, por lo tanto primero se hará esto.

En la figura 5-9 se especifica la forma de $V(x)$ que se utilizará en estos argumentos, graficándola contra su variable independiente x. La forma se ha escogido de manera que

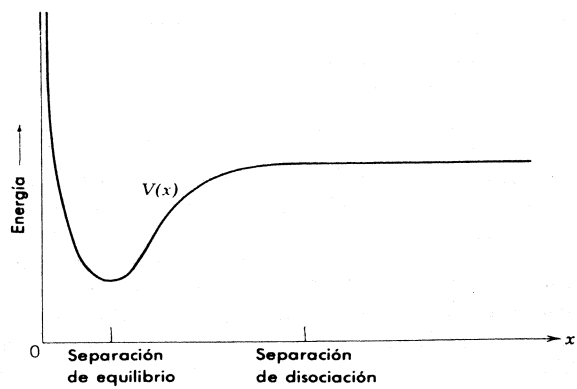


FIGURA 5-9

Energía potencial $V(x)$ para un átomo que puede estar ligado a un átomo similar para formar una molécula diatómica, graficada como una función de la separación entre los centros de los dos átomos.

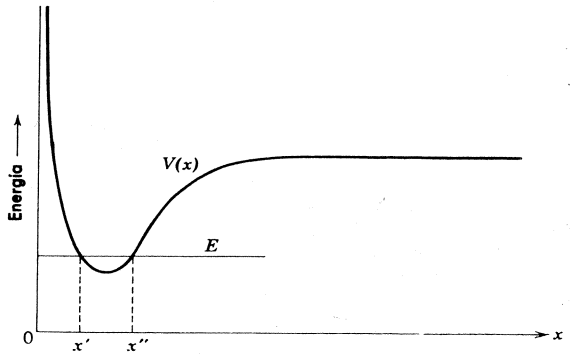


FIGURA 5-10

Energía potencial $V(x)$ utilizada en los argumentos cuánticos concernientes a las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la energía total escogida para estos argumentos.

contenga rasgos que permitan ilustrar varios puntos interesantes; pero la forma también tiene significado físico. Representa la energía potencial para un átomo que puede estar ligado a un átomo similar y formar una molécula diatómica. En este caso la coordenada x representa la separación entre los centros de los dos átomos. El mínimo en $V(x)$ ocurre para la separación de equilibrio y en él la fuerza que actúa sobre el átomo es $F = -dV(x)/dx = 0$. Conforme la separación del valor de equilibrio decrezca, aparecerá una fuerza repulsiva en la dirección en la que se incrementa la separación y se hace mayor entre más cerca están los átomos. Cuando la separación aumente aparecerá una fuerza atractiva en la dirección en la que la separación decrezca. Pero si la separación excede la separación de disociación indicada en la figura 5-9, la fuerza cae a cero ya que la molécula se rompe y los átomos ya no interaccionan.

Con la elección de $V(x)$ la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45) empieza a tomar una forma específica. Ya que esta ecuación diferencial contiene la energía total E en una situación crucial, se deberá escoger su valor de modo que la ecuación tenga propiedades que sean los suficientemente específicas como para hacerla fácil de analizar. El valor seleccionado está indicado en la figura 5-10 por la línea horizontal: energía $= E =$ constante. Esta figura también muestra la curva: energía $= V(x)$. Se escoge la energía total E *de tal manera que la molécula esté ligada (clásicamente la distancia de separación* x *entre los átomos deberá estar entre los valores* x' y x'' mostrados en la figura), pero el valor exacto de E que se escoge en esta etapa es arbitrario. No se tiene que decir nada acerca de la combinación de parámetros $2m/\hbar^2$, que aparece en la ecuación diferencial, excepto que tiene un valor positivo.

El argumento considerará la ecuación (5-45) como una fórmula que determina el valor de la segunda derivada $d^2\psi/dx^2$ de la solución, en una x determinada, en términos de los valores de $(2m/\hbar^2)\,[V(x) - E]$ y de la solución ψ misma en esa x. Eso permitirá estudiar propiedades importantes de la ecuación en términos de la forma general de la curva trazada por una gráfica de ψ contra x. Entonces se obtendrá una interpretación geométrica de la ecuación diferencial.

Particularmente se atenderá al signo de $d^2\psi/dx^2$ ya que es una propiedad de las segundas derivadas que una curva, de la variable dependiente graficada contra la variable independiente, es cóncava hacia arriba siempre que la segunda derivada sea positiva y cóncava hacia abajo siempre que la segunda derivada sea negativa. Los estudiantes que aún no estén familiarizados con esta propiedad deberán analizar la figura 5-11 que muestra un caso en el cual la pendiente de

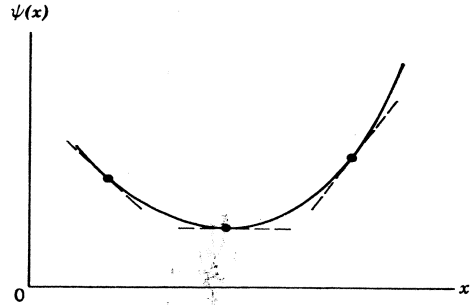


FIGURA 5-11

Curva que es *cóncava hacia arriba*. El valor de la primera derivada de la función representada por la curva, aumenta al aumentar x, así la segunda derivada es positiva.

la curva de ψ contra x es negativa para x pequeñas, se hace menos negativa cuando x aumenta, pasa por cero y entonces se hace positiva conforme x continúa aumentando. La pendiente que es igual a $d\psi/dx$ siempre aumenta en valor numérico conforme x aumenta. Por lo tanto, la razón de cambio de la pendiente que es igual a $d^2\psi/dx^2$ siempre es positiva. Se dice que la curva en esta figura es *cóncava hacia arriba*. La figura 5-12 muestra un caso en el cual se dice que la curva es *cóncava hacia abajo*. Consideraciones similares prueban que en este caso $d^2\psi/dx^2$ siempre es negativa.

Ahora obsérvese que en la figura 5-10 hay dos intersecciones de la línea energía $= E$ y la curva energía $= V(x)$. Estas intersecciones ocurren en $x = x'$ y $x = x''$, las cuales dividen al eje x en tres regiones: $x < x'$, $x' < x < x''$, y $x > x''$. En la primera y tercera regiones la cantidad $[V(x) - E]$ es positiva ya que el valor de $V(x)$ siempre es mayor que el valor de E en estas regiones. En la segunda región $[V(x) - E]$ es negativa. El análisis de (5-45) muestra entonces que el signo de $d^2\psi/dx^2$ es el mismo que el signo de ψ en la primera y tercera regiones y es opuesto al signo de ψ en la segunda región, ya que el signo de $2m/\hbar^2$ es positivo. Esto significa que en la primera y tercera regiones la curva de ψ contra x será cóncava hacia arriba si el valor de ψ misma es positiva y será cóncava hacia abajo si el valor de ψ es negativo. En la segunda región la curva será cóncava hacia abajo si ψ es positiva y será cóncava hacia arriba si ψ es negativa. Las distintas posibilidades se muestran en la figura 5-13. Se han sentado las bases para la interpretación geométrica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Para una forma de la energía potencial $V(x)$ dada, la ecuación diferencial establece una relación entre $d^2\psi/dx^2$ y ψ que determina el comportamiento *general* de ψ. Si además se especifica el valor de ψ y de su primera derivada $d\psi/dx$ para algún valor de la variable independiente x, entonces el comportamiento *particular* de la variable dependiente ψ está determinado para todos los valores de x. La situación es completamente análoga a las situaciones que se

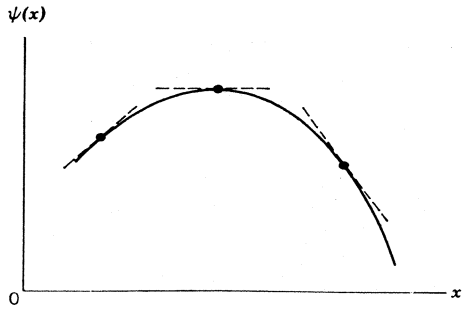


FIGURA 5-12

Curva *cóncava hacia abajo*. El valor de la primera derivada de la función decrece cuando x crece, así la segunda derivada es negativa.

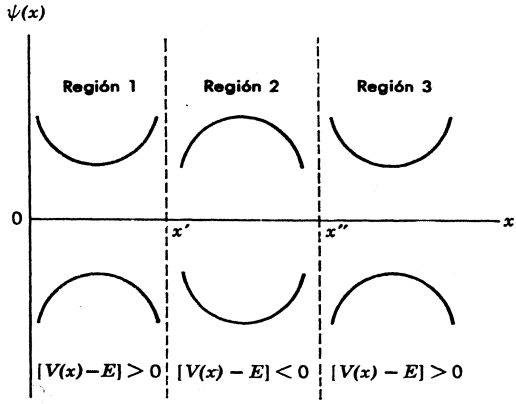


FIGURA 5-13

Ilustración de la relación entre el signo de ψ y el signo de $d^2\psi/dx^2$ en las regiones definidas por el signo de $[V(x) - E]$. La relación se puede resumir estableciendo que ψ es cóncava desde el eje x siempre que $[V(x) - E] > 0$, y cóncava hacia el eje x siempre que $[V(x) - E] < 0$.

encontraron en la mecánica clásica. Considérese la ecuación diferencial para un oscilador armónico simple clásico

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{Cx}{m}$$

Esta es justamente la ley de Newton del movimiento, $a = F/m$, con una constante de restitución C. En este caso x es la variable dependiente y t la variable independiente, pero por lo demás la analogía es completa. La ecuación diferencial establece una relación entre x y su segunda derivada que determina el comportamiento general de x como una función de t. Otra vez, si se especifica el valor de x y de su primera derivada dx/dt para algún valor de t (las condiciones iniciales del movimiento), entonces el comportamiento particular de x está determinado para todos los valores de t.

Por lo tanto, sería posible utilizar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para la $V(x)$ y la E escogidas, para determinar el comportamiento de ψ para toda x en términos de los valores de ψ y de $d\psi/dx$ supuestos para alguna x particular. En los siguientes capítulos y en el apéndice F se muestran los cálculos cuantitativos a este respecto; aquí se obtendrán resultados cualitativos a partir de argumentos basados en las características de la ecuación diferencial desarrollada. Los argumentos se presentarán como "cálculos pensados", con el mismo espíritu que los argumentos pensados de Einstein o Bohr.

En la curva 1 de la figura 5-14 se indican cualitativamente los resultados de un cálculo pensado que comienza con los valores de ψ y de $d\psi/dx$ supuestos para un punto conveniente x_0 en la segunda región y continúa trazando el comportamiento de ψ en la dirección en la que x crece. Puesto que el valor inicial de ψ se escogió como positivo en la región $x' < x < x''$, se encuentra que la curva descrita por ψ es inicialmente cóncava hacia abajo y continúa así hasta que pasa a la tercera región $x > x''$, donde $[V(x) - E]$ cambia de signo. No obstante que la pendiente de la curva era negativa en $x = x''$, rápidamente se hace cero y después positiva. Entonces ψ empieza a crecer en valor y rápidamente pasa de mal a peor. La razón es que la ecuación diferencial muestra que el ritmo de cambio dependiente, es decir, $d^2\psi/dx^2$ es proporcional a la distancia de la curva al eje, es decir, Ψ. Este primer cálculo produce una ψ que se va al infinito conforme crece x. Se encontró una solución parcial a la ecuación diferencial, pero no fue una solución aceptable, porque una eigenfunción aceptable permanece finita.

La curva 2 de la figura 5-14 indica el resultado de otro intento por encontrar una solución aceptable. No hubo cambio en el valor inicial supuesto para ψ que hubiera sido solamente expandir o contraer la escala vertical de la curva debido a la linealidad de la ecuación

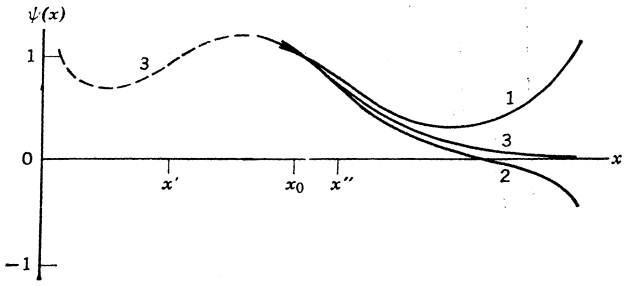


FIGURA 5-14

Tres intentos para encontrar una solución aceptable para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un valor supuesto de la energía total E. Las dos primeras (1,2) fallan porque la solución se hace infinita para x grandes. La tercera dio una solución con comportamiento aceptable para x grande, pero falla porque la solución se hace infinita para x pequeña (curva punteada).

diferencial. Lo que se hizo fue cambiar el valor inicial puesto para $d\psi/dx$. El intento no tuvo éxito ya que ψ resulta negativa en la región donde $[V(x) - E]$ es positiva. La curva resulta cóncava hacia abajo y se va a menos infinito.

Ahora resultará evidente la dificultad para obtener una eigenfunción aceptable. También resultará evidente que escogiendo *exactamente* el valor inicial de $d\psi/dx$, es posible encontrar una ψ cuyo comportamiento aceptable al crecer x es el que se indica por la curva 3 de la figura 5-14. Para esta ψ la curva es cóncava hacia arriba en la tercera región, ya que permanece por encima del eje x. Sin embargo, la curva no dobla hacia arriba ya que conforme crece x, ésta se encuentra cada vez más cerca del eje y mientras más cerca está la curva se hace menos cóncava hacia arriba. Esto es $d^2\psi/dx^2$ se aproxima a cero conforme ψ se aproxima a cero ya que la ecuación diferencial dice que estas dos cantidades son proporcionales.

En la figura 5-14 también se indican mediante una curva punteada los resultados de extender la ψ de la curva 3 en la dirección en la que x decrece. Del análisis anterior se debe esperar que, en general, ψ se irá ya sea hacia más o hacia menos infinito cuando se le extiende hacia las x decrecientes. Esto no se puede evitar ajustando la elección inicial de $d\psi/dx$, ya que esto perturbaría el comportamiento aceptable para x grandes, tampoco se puede evitar el valor infinito de ψ para x pequeñas uniendo dos funciones ψ diferentes con pendientes diferentes en $x = x_0$, lo cual está reglamentado por el requisito de que para una eigenfunción aceptable, $d\psi/dx$ es continua en todas partes. Por una razón similar no es posible tratar una discontinuidad en ψ misma. Estamos forzados a concluir que para el valor particular de la energía total E que se escogió inicialmente, no existe solución aceptable a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. La relación entre ψ y su segunda derivada $d^2\psi/dx^2$, que impone la ecuación diferencial para una $V(x)$ dada y la E correspondiente, es tal que se aproximará a $\pm\infty$ ya sea para x grandes o x pequeñas (o ambas). La solución a la ecuación diferencial es inestable en el sentido de que tiene una tendencia pronunciada a irse a infinito en las regiones donde $E < V$.

Sin embargo, repitiendo este procedimiento para muchas elecciones diferentes de la energía E, eventualmente será posible encontrar un valor E_1 para el cual la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene una solución aceptable ψ_1. De hecho, en general existirán un número de *valores permitidos de la energía total* E_1, E_2, E_3, . . . para los cuales la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene *soluciones aceptables* ψ_1, ψ_2, ψ_3, . . . En la figura 5-15 se indica la forma de las primeras tres soluciones aceptables. El comportamiento de ψ_1 tanto para x pequeñas como grandes, es el mismo que el comportamiento para x grandes de la función

mostrada en la curva 3 de la figura 5-14. Para $x' < x_0$, el comportamiento de ψ_2 inicialmente es similar al comportamiento de ψ_1, pero ya que su segunda derivada es relativamente grande en magnitud, ψ_2 cruza el eje en algún valor de x menor que x_0 pero mayor que x'. Cuando esto sucede, el signo de la segunda derivada se invierte y la función resulta cóncava hacia arriba. En $x = x'$ nuevamente se invierte la segunda derivada y para $x < x'$, la función gradualmente se aproxima al eje x.

De la figura 5-15 se puede ver que la energía permitida E_2 es mayor que la energía permitida E_1. Considérese el punto x_0 en el que ψ_1 y ψ_2 tienen el mismo valor. De la figura es evidente que en ese punto la razón de cambio de la pendiente para ψ_2 excede por la misma cantidad al de ψ_1 es decir,

$$\left| \frac{d^2\psi_2}{dx^2} \right| > \left| \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \right|$$

Utilizando esto en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45), se encuentra que

$$|V(x) - E_2| > |V(x) - E_1|$$

De la figura 5-15 es evidente que si esto es cierto en x_0 entonces

$$E_2 > E_1$$

ya que $E > V(x)$ para x_0. De argumentos similares es posible demostrar que $E_3 > E_2$. También resulta evidente que las diferencias de energía $E_2 - E_1$, $E_3 - E_2$, no son infinitesimales puesto que, por ejemplo, la diferencia en la primera desigualdad mostrada arriba no es infinitesimal. Por tanto, los valores permitidos de la energía están *bien separados* y forman un *conjunto discreto* de energías. Para una partícula que se mueve bajo la influencia de un potencial $V(x)$ independiente del tiempo, solamente existen soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo si la energía de la partícula está *cuantizada*, esto es, restringida a un conjunto discreto de energías $E_1, E_2, E_3, \ldots$

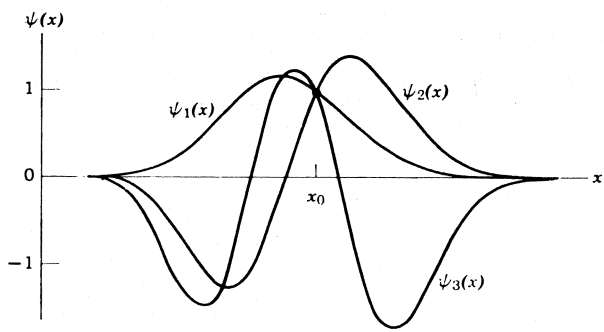


FIGURA 5-15

Forma de las eigenfunciones aceptables correspondientes a los tres estados de energía mínima permitida para un potencial con un mínimo. Para $x = x_0$ las tres funciones tienen el mismo valor, pero ψ_3 tiene la mayor curvatura porque corresponde a la energía mayor entre estas tres. Las soluciones son para el potencial de la figura 5-10 y no son simétricas entre izquierda y derecha porque el potencial no es simétrico alrededor de su mínimo.

Esta aseveración es válida siempre que la relación entre la energía potencial $V(x)$ y la energía total E sea similar a la que se muestra en la figura 5-10, en el sentido de que existen dos valores para la coordenada, x' y x'', con $[V(x) - E]$ positiva para toda $x < x'$ y también positiva para toda $x > x''$. Pero para un potencial del tipo ilustrado en la figura 5-9, esto es, un potencial que tiene un valor límite finito V_l cuando x se hace muy grande, generalmente sólo existe lugar para un número finito de valores de energía permitidos discretos, los cuales satisfacen la relación $E < V_l$; esto se ilustra en la figura 5-16. Para $E > V_l$, la situación cambia, ahora la molécula no está ligada (clásicamente la distancia de separación x entre los átomos puede tener cualquier valor mayor que x'). Por lo que concierne a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, solamente hay dos regiones del eje x: $x < x'$ y $x > x'$. En la segunda región $V(x) - E]$ será negativa para todos los valores de x sin importar cuán grande sea ésta; pero cuando $[V(x) - E]$ es negativa ψ es cóncava hacia abajo si su valor es positivo y cóncava hacia arriba si su valor es negativo. Esta siempre tiende a regresar al eje x y por lo tanto es una función oscilatoria; consecuentemente, no existe problema de que $\psi(x)$ se vaya a infinito para valores grandes de x. Ya que siempre es posible que $\psi(x)$ se aproxima gradualmente al eje para valores pequeños de x mediante una selección inicial apropiada de $d\psi/dx$, y entonces será posible encontrar una eigenfunción aceptable para *cualquier* valor de $E > V_l$. Entonces los valores de energía permitidos para E_l están *distribuidos de manera continua* y se dice que forman un *continuo*. Es evidente que si el potencial $V(x)$ está restringido en valor para valors de x pequeños, o para valores de x grandes y pequeños, entonces las energías permitidas formarán un continuo para todas las energías mayores que la V_l más baja.

La conclusión de nuestros argumentos se puede establecer concisamente como sigue:

Cuando la relación entre la energía total de una partícula y su energía potencial es tal que clásicamente la partícula debería estar ligada a una región limitada del espacio debido a que la energía potencial debería exceder a la energía total fuera de la región, entonces la teoría de Schrodinger predice que la energía total está cuantizada. Cuando esta relación es tal que la partícula no está ligada a una región limitada, entonces la teoría predice que la energía total puede tener cualquier valor.

Puesto que en la mecánica clásica una partícula ligada a una región limitada debería moverse periódicamente entre los límites de la región, las reglas de Wilson Sommerfeld de la teoría cuántica antigua también deberían predecir una cuantización de la energía de la partícula en estas circunstancias. Pero estas reglas de cuantización eran un postulado de la teoría cuántica antigua que tenían una justificación en la relación de de Broglie sólo para ciertos casos especiales. En su primera publicación sobre mecánica cuántica, Schrödinger escribió:

"El punto esencial es el hecho de que los misteriosos "requisitos de integridad" no permanecen en las reglas de cuantización pero han trazado, por así decirlo, un paso que ha mostrado el resultado de la finitud y el valor único de ciertas funciones espaciales (una eigenfunción)".

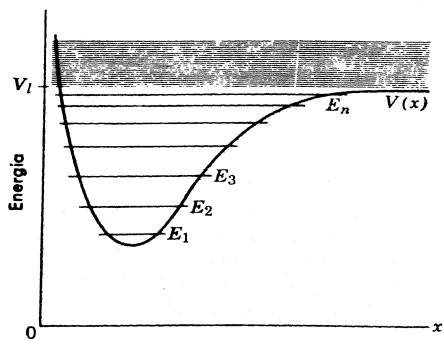


FIGURA 5-16

Ilustración de energías permitidas separadas discretamente E_n que se encuentran por debajo del valor límite V_l de un potencial $V(x)$, y el continuo de E_n que se encuentra por arriba. Puesto que $E_{n+1} - E_n$ decrece conforme $V(x)$ se aproxima a V_l, si el acercamiento es lo suficientemente gradual puede haber un número infinito de $E_n < V_l$. Pero generalmente sólo hay un número finito.

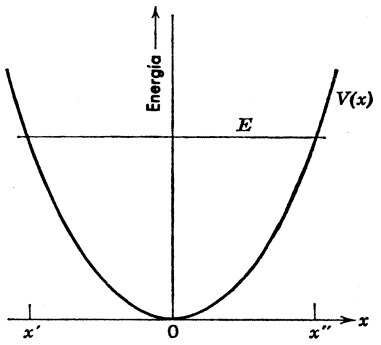


FIGURA 5-17

La energía potencial $V(x)$ y uno de los valores más altos permitidos para la energía total E para un oscilador armónico simple.

Ejemplo 5-12. Usar los argumentos desarrollados en esta sección para dar conclusiones *cualitativas* concernientes con la forma de las eigenfunciones para uno de los estados de energía más alta de un oscilador armónico simple. Comparar a continuación la función densidad de probabilidad correspondiente, con la que debería predecirse para un oscilador armónico simple clásico de la misma energía.

El potencial $V(x)$ para un oscilador armónico simple (ver ejemplo 5-3) está representado por la curva de la figura 5-17. En la misma figura uno de los mayores valores permitidos de la energía total E está representado por una línea horizontal. De acuerdo con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45)

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi$$

la eigenfunción ψ será una función oscilatoria en la región donde $[V(x)-E]$ es negativa ya que $d^2\psi/dx^2$ será negativa (cóncava hacia abajo) si ψ es positiva en esa región, mientras que $d^2\psi/dx^2$ será positiva (cóncava hacia arriba) si ψ es negativa en esa región. Sin embargo, ψ oscilará menos rápidamente en la proximidad de los extremos de la región que lo que lo hace en las cercanías del centro ya que la magnitud de $d^2\psi/dx^2$ que determina la rapidez de oscilación ψ es proporcional a la magnitud de $[V(x)-E]$ y la diferencia entre $V(x)$ y E se hace menor conforme se aproxima a los extremos de la región. Por lo tanto, la separación entre los nodos de la función oscilatoria aumenta en las vecindades de los extremos de la región en la manera indicada en la figura 5-18; la cual muestra la amplitud de las oscilaciones en ψ aumentando conforme se aproxima a los extremos de la región. La razón es que Ψ se hará mayor en magnitud donde "se dobla", si $[V(x)-E]$ se hace menor en magnitud, para que $d^2\psi/dx^2$ que es proporcional a su producto, continúe teniendo una magnitud lo suficientemente grande para hacer que se doble. Obsérvese que la figura 5-18 indica que ψ se aproxima gradualmente al eje en el exterior de la región en la que $[V(x)-E]$ es negativa, tal como se requiere para una eigenfunción aceptable de un estado ligado. Obsérvese también que cuando ψ cruza los puntos en los que $[V(x)-E]$ cambia de signo, no tiene curvatura debido a que tanto esta cantidad como $d^2\psi/dx^2$ son cero en estos puntos.

La función densidad de probabilidad es esencialmente el cuadrado de ψ, y se indica por la curva sólida en la figura 5-19; en la misma figura la curva punteada indica la densidad de probabilidad que debería esperarse en la mecánica clásica para una partícula en movimiento armónico simple en el mismo potencial con la misma energía total. Como se discutió largamente en el ejemplo 5-6 la densidad de probabilidad clásica resulta relativamente grande cerca de los extremos de la región donde $[V(x)-E]$ es negativa puesto que la partícula se mueve más lentamente cerca de los extremos. En realidad la figura muestra las densidades de probabilidad según la mecánica clásica y según la mecánica cuántica, para un estado de energía E moderadamente grande (se trata de E_{13}) pero hace aparente la naturaleza de la correspondencia entre las densidades de probabilidad encontradas en el límite clásico de valores de E muy grandes (E_n cuando $n \to \infty$). En este límite la densidad de probabilidad mecánico cuántica fluctúa dentro de distancias tan pequeñas que solamente su comportamiento promedio, el cual está de acuerdo con la predicción clásica, se puede detectar experimentalmente. También en el límite clásico la densidad de probabilidad mecánico-cuántica no penetra una distancia mensurable fuera de la región en la que $[V(x)-E]$ es negativa

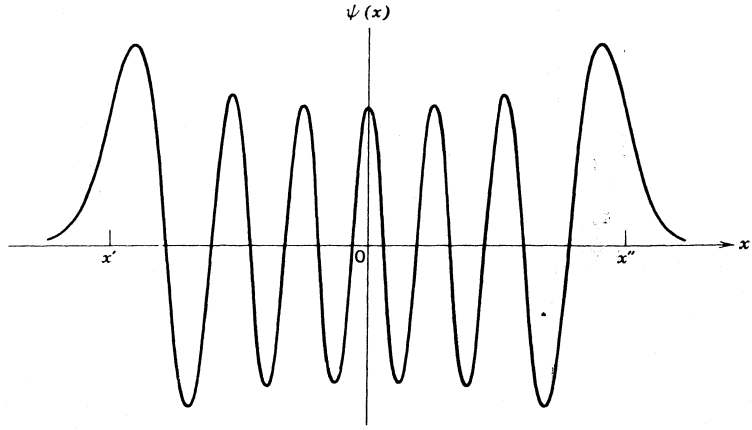


FIGURA 5-18

Eigenfunción para la decimotercera energía permitida del oscilador armónico simple. Los límites clásicos del movimiento están indicados por x' y x''.

debido a que la distancia de penetración es comparable a la distancia en la cual fluctúa. Esto está de acuerdo con el corte tajante predicho por la densidad de probabilidad clásica. Para un oscilador armónico simple idealizado, $V(x)$ permanece proporcional a x^2, aún para valores muy grandes de x^2 y por lo tanto todas las energías permitidas están separadas en forma discreta. ◀

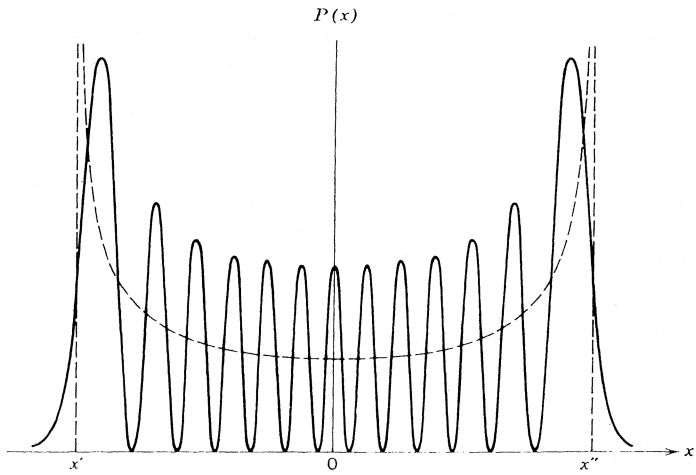


FIGURA 5-19

La curva sólida es la función densidad de probabilidad para la decimotercera energía permitida del oscilador armónico simple. La curva punteada es la función densidad de probabilidad clásica para el movimiento armónico simple con la misma energía y es muy próxima al valor promedio de la función fluctuante mecánico-cuántica. Compare estas funciones para la primera energía permitida mostrada en la figura 5-3.

5.8 Resumen

Un sistema mecánico-cuántico particular está descrito por una función de energía potencial particular. Se ha encontrado que si el potencial es independiente del tiempo, es decir si se puede escribir $V(x)$, la ecuación de Schrödinger para el potencial conduce inmediatamente a la correspondiente ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. También se ha encontrado que existen soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo solamente para ciertos valores de la energía, los cuales se enlistan en el orden de energía creciente como

$$E_1, E_2, E_3, \ldots, E_n, \ldots$$

A estas energías se les llama *eigenvalores* del potencial $V(x)$; un potencial particular tiene un conjunto particular de eigenvalores. Los primeros eigenvalores en la lista estarán separados discretamente en energía. Sin embargo, a menos que el potencial crezca sin límite tanto para valores muy grandes como para valores muy pequeños de x, los eigenvalores resultan distribuidos de manera continua en la energía más allá de cierto valor de ésta.

Correspondiendo a cada eigenvalor hay una *eigenfunción*

$$\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \ldots, \psi_n(x), \ldots$$

que es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial $V(x)$.

Para cada eigenvalor también existe una *función de onda* correspondiente

$$\Psi_1(x,t), \Psi_2(x,t), \Psi_3(x,t), \ldots, \Psi_n(x,t), \ldots$$

De (5-44) se sabe que estas funciones son

$$\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}, \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}, \psi_3(x)e^{-iE_3t/\hbar}, \ldots, \psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}, \ldots$$

Cada función de onda es una solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(x)$.

El índice n, que toma valores enteros sucesivos y que se utiliza para designar a un eigenvalor particular, su eigenfunción correspondiente y la función de onda, se denomina *número cuántico*. Si el sistema está descrito por la función de onda $\Psi_n(x,t)$, se dice que está en el *estado cuántico n*.

Cada una de las funciones de onda $\Psi_n(x,t)$ es una solución particular a la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(x)$. Ya que esta ecuación es lineal en la función de onda, se espera que cualquier combinación lineal de estas funciones también sea solución. Esto se verificó en el ejemplo 5-2 para el caso de una combinación lineal de dos funciones de onda, pero la prueba se puede extender para mostrar que una combinación lineal arbitraria de *todas* las funciones de onda que son soluciones a la ecuación de Schrodinger para un potencial particular $V(x)$, es decir,

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t) + \cdots + c_n\Psi_n(x,t) + \cdots \tag{5-46}$$

también es solución a la ecuación de Schrodinger. De hecho esta expresión da la forma más general de la solución a la ecuación de Schrodinger para un potencial $V(x)$. Esto generalmente se puede apreciar observando que existe una función compuesta de un número muy grande de funciones diferentes combinadas en proporciones gobernadas por las constantes ajustables c_n

Debe observarse que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo también es una ecuación lineal, pero en contraste con la ecuación de Schrödinger, contiene la energía total E en forma explícita. Por lo tanto, una combinación lineal arbitraria de soluciones diferentes satisfacerá la ecuación *solamente* si todas corresponden al mismo valor de E. En el capítulo siguiente se verá que existen dos soluciones

diferentes a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que corresponden al mismo valor de E ya que la ecuación contiene una segunda derivada. También se verá que ambas soluciones no siempre son aceptables, aun para un valor permitido de E.

Ejemplo 5-13. Cuando una partícula se encuentra en un estado tal que una medida de su energía total sólo puede conducir a un resultado, el eigenvalor E, está descrita por la función de onda

$$\Psi = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Un ejemplo (cuya tridimensionalidad no es importante aquí) sería un electrón en el estado base de un átomo de hidrógeno. En este caso, la función densidad de probabilidad

$$\Psi^*\Psi = \psi^*(x)e^{+iEt/\hbar}\psi(x)e^{-iEt/\hbar} = \psi^*(x)\psi(x)$$

no depende del tiempo. Considérese a una partícula en un estado tal que una medida de su energía total pudiera conducir a alguno de los dos resultados, el eigenvalor E_1 o el eigenvalor E_2. Entonces la función de onda que describe a la partícula es

$$\Psi = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

Un ejemplo podría ser el de un electrón que está en el proceso de efectuar una transición desde un estado excitado al estado base del átomo. Demostrar que en este caso la función densidad de probabilidad es una función oscilatoria en el tiempo y calcular la frecuencia de las oscilaciones.

Para la densidad de probabilidad se tiene

$$\Psi^*\Psi = [c_1^*\psi_1^*(x)e^{+iE_1t/\hbar} + c_2^*\psi_2^*(x)e^{+iE_2t/\hbar}][c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}]$$

Multiplicando los dos términos entre paréntesis, se obtienen cuatro términos

$$\begin{aligned}\Psi^*\Psi = {} & c_1^*c_1\psi_1^*(x)\psi_1(x) + c_2^*c_2\psi_2^*(x)\psi_2(x) \\ & + c_2^*c_1\psi_2^*(x)\psi_1(x)e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} \\ & + c_1^*c_2\psi_1^*(x)\psi_2(x)e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\end{aligned} \tag{5-47}$$

En los primeros dos se cancela la dependencia temporal, pero no así en los dos últimos. Estos dos términos contienen exponenciales complejas que oscilan en el tiempo con frecuencia ν; volviendo a escribir las exponenciales complejas como en (5-41a) y (5-41b), se ve inmediatamente que

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{2\pi\hbar} = \frac{E_2 - E_1}{h} \tag{5-48}$$

◀

Acerca de los resultados del ejemplo 5-13 se pueden hacer comentarios muy interesantes. Considérese un electrón en el estado base de un átomo de hidrógeno; puesto que es posible localizar al electrón en cualquier parte donde la densidad de probabilidad tenga un valor apreciable, la carga portada no estará confinada a una región particular. Entonces, cuando se habla de las propiedades promedio del electrón en el átomo, resulta apropiado hablar de su distribución de carga, la cual es proporcional a su densidad de probabilidad. Puesto que la densidad de probabilidad en el estado base es independiente del tiempo, la distribución de carga también lo es. Pero aún en el electromagnetismo clásico una distribución de carga estática no emite radiación. Se ve que la mecánica cuántica proporciona una forma para resolver una paradoja de la teoría cuántica antigua respecto a la estabilidad, contra la emisión de radiación, de los átomos en sus estados base.

Los átomos que están excitados no emiten radiación y eventualmente regresan a su estado base. Considérese un electrón en el proceso de realizar una transición desde un estado excitado

al estado base de un átomo de hidrógeno. Su densidad de probabilidad y por lo tanto la distribución de carga asociada oscila en el tiempo con una frecuencia dada por (5-48)

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

donde E_2 es la energía del estado excitado y E_1 es la energía del estado base. Según el electromagnetismo clásico debería esperarse que esta distribución de carga emitiera radiación con la misma frecuencia pero ésta es también precisamente la frecuencia del fotón que Bohr y Einstein afirman debería emitirse, ya que la energía transportada por el fotón es $E_2 - E_1$. Por supuesto que esto no puede ocurrir para un electrón en el estado base del átomo ya que *no* hay estado de menor energía para el estado base que se mezcle y produzca una densidad de probabilidad oscilatoria o distribución de carga.

Además de predecir correctamente las frecuencias de los fotones emitidos en transiciones atómicas, la mecánica cuántica también predice correctamente las probabilidades por segundo de que la transición ocurra. En el capítulo 8 se obtendrán estas predicciones mediante una extensión simple de los cálculos del ejemplo 5-13. Ahí se verá que las sorprendentes reglas de selección de la teoría cuántica antigua se siguen como una consecuencia inmediata de estas predicciones.

Schrödinger destacaba el hecho de que su teoría proporcionaba una descripción física del proceso de emisión de radiación por átomos excitados que era mucho más rica que la proporcionada por la teoría de Bohr. Al analizar las ventajas de su teoría él escribió: "Es sumamente necesario apuntar lo grato que sería concebir una transición cuántica como un cambio de energía entre un modo vibracional y otro, en vez de considerarla como un salto de electrones".

PREGUNTAS

1. ¿Por qué hay dificultades para aplicar el postulado de de Broglie $\lambda = h/p$, a una partícula cuyo impulso lineal cambia en magnitud?

2. ¿Cómo encaja el postulado de de Broglie en la teoría de Schrödinger?

3. ¿La evidencia experimental acerca de la aplicación de la relación $\nu = E/h$, de de Broglie-Einstein a las funciones de onda para partículas materiales es tan firme como la evidencia de que ésta se aplica a las ondas electromagnéticas y a los fotones? ¿La evidencia de que esta relación se aplica a las funciones de onda es tan firme como la evidencia de que $\lambda = h/p$ se aplica a las funciones de onda?

4. ¿Cuál sería el efecto sobre la teoría de Schrödinger si se cambiara la definición de energía total en la relación $\nu = E/h$ añadiéndole la constante de energía por masa en reposo de la partícula?

5. ¿Por qué la ecuación de Schrödinger no es válida para partículas relativistas?

6. ¿Newton derivó sus leyes de movimiento? ¿O las obtuvo de argumentos de plausibilidad?

7. Dar una razón por la cual la ecuación de Schrödinger se escribe en términos de la energía potencial y no en términos de la fuerza.

8. ¿Por qué es tan importante en la ecuación de Schrödinger el que la función de onda sea lineal?

9. La masa m de una partícula aparece explícitamente en la ecuación de Schrödinger pero no así su carga e a pesar de que ambas tienen efecto sobre su movimiento, ¿Por qué?

10. Las funciones de onda de la física clásica contienen una segunda derivada espacial y una segunda derivada temporal; la ecuación de Schrödinger contiene una segunda derivada espacial y una

primera derivada temporal. Utilice estos hechos para explicar por qué las soluciones a las ecuaciones de onda clásica pueden ser funciones reales, mientras que las soluciones a la ecuación de Schrödinger deben ser funciones complejas.

11. ¿Por qué la ecuación de Schrödinger contiene una primera derivada temporal?

12. Explique por qué no es posible medir el valor de una cantidad compleja.

13. En electromagnetismo se calcula la intensidad de una onda tomando el cuadrado de su amplitud. ¿Por qué no se hace exactamente lo mismo con las ondas mecánico-cuánticas?

14. Considérese una onda de agua que viaja por la superficie del océano, ¿Si nadie observa la onda ni nadie piensa en ella, podría usted afirmar que la onda existe? ¿Daría usted automáticamente la misma respuesta para una onda mecánico-cuántica? si su respuesta es no explique por qué.

15. ¿Cuál es la conexión básica entre las propiedades de una función de onda y el comportamiento de la partícula asociada?

16. ¿Por qué la función densidad de probabilidad tiene que ser real, no negativa y de valor finito y definido en todas partes?

17. Explicar en palabras, qué se entiende por normalización de una función de onda.

18. Si no se aplica la condición de normalización ¿Cómo puede una función de onda multiplicarse por un factor constante y continuar siendo solución a la ecuación de Schrödinger?

19. ¿Por qué la mecánica cuántica de Schrödinger proporciona solamente información estadística? En su opinión, ¿esto refleja una falla de la teoría o una propiedad de la naturaleza?

20. Ya que la función de onda que describe el comportamiento de una partícula satisface una ecuación diferencial, su evolución en el tiempo es perfectamente predecible. ¿Cómo concuerda este hecho con el principio de incertidumbre?

21. Establecer en palabras el significado del valor de expectación de x.

22. ¿Por qué es necesario utilizar un operador diferencial para calcular el valor de expectación de p?

23. ¿Existen otros ejemplos en ingeniería o matemáticas en los cuales los operadores diferenciales estén relacionados con cantidades físicas?

24. ¿Piensa usted que es legítimo decir que se ha *resuelto* una ecuación diferencial si se adivina la forma de la solución y posteriormente se verifica esta adivinanza por substitución?

25. Explicar brevemente el significado de una eigenfunción bien comportada con el contexto de la mecánica-cuántica de Schrödinger.

26. ¿Por qué una eigenfunción debe ser bien comportada para que sea aceptable en la teoría de Schrödinger?

27. Explicar en dos o tres frases por qué la energía de cuantización está relacionada con el carácter de buen comportamiento de las eigenfunciones aceptables.

28. ¿Por qué ψ es necesariamente una función oscilatoria si $V(x) < E$?

29. ¿Por qué ψ tiende a irse a infinito si $V(x) > E$?

30. ¿Siempre es posible para un valor permitido de la teoría total E de un sistema ser menor que el valor mínimo de su energía potencial $V(x)$? Dar un argumento cualitativo a lo largo de las líneas de los argumentos de la sección 5-7 para justificar su respuesta.

31. Se han visto varios ejemplos con el resultado de que el valor permitido más bajo para la energía total E

de una partícula ligada de un potencial $V(x)$, está por debajo del valor mínimo de $V(x)$. Utilizar el principio de incertidumbre en un argumento cualitativo para explicar por qué esto debe ser así.

32. Si una partícula no está ligada en un potencial su energía total no está cuantizada. ¿Esto significa que el potencial *no* tiene efecto en el comportamiento de la partícula? ¿Qué efectos esperaría usted que tuviera?

PROBLEMAS

1. Si las funciones de onda $\Psi_1(x,t)$, $\Psi_2(x,t)$, y $\Psi_3(x,t)$ son tres soluciones a la ecuación de Schrödinger para un potencial particular $V(x,t)$, demostrar que la combinación lineal arbitraria $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t) + c_3\Psi_3(x,t)$ también es solución de esta ecuación.

2. La dependencia de una función de onda con la posición para cierto instante se muestra en la figura 5-20. (a) Si en tal instante se hiciera una medición que pudiera localizar a la partícula asociada en un elemento dx del eje x, ¿dónde sería más probable encontrarla? (b) ¿Dónde sería menos probable encontrarla? (c) ¿Son mayores las probabilidades de encontrarla en *cualquier* valor positivo del eje x, o en *cualquier* valor negativo?

3. (a) Determinar la frecuencia ν de la parte dependiente del tiempo de la función de onda mencionada en el ejemplo 5-3, para el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple. (b) Utilice este valor de ν y la relación de Broglie-Einstein $E = h\nu$, para evaluar la energía total E del oscilador. (c) Utilice este valor de E para demostrar que los límites del movimiento clásico del oscilador, encontrados en el ejemplo 5-6, se pueden escribir como $x = \pm\hbar^{1/2}/(Cm)^{1/4}$.

4. Evaluando la integral clásica de normalización del ejemplo 5-6, determinar el valor de la constante B^2 que satisface el requisito de que la probabilidad total de encontrar a la partícula en alguna parte dentro de los límites del movimiento para el oscilador clásico debe ser igual a uno.

5. Utilizar los resultados del ejemplo 5-5, 5-6, y 5-7 para evaluar la probabilidad de encontrar a una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple mecánico cuántico. dentro de los límites del movimiento clásico. (Sugerencia: (i) los límites clásicos del movimiento se expresan en una forma conveniente en el enunciado del problema 3c. (ii) La integral definida que se obtendrá se puede expresar como una integral de probabilidad o una función de error. Es posible evaluarla de inmediato consultando manuales matemáticos que tabulen estas cantidades. Alternativamente, se puede evaluar la integral definida graficándola en papel para gráficas y contando los cuadrados para encontrar el área encerrada entre el integrando, el eje y los límites).

6. A temperaturas suficientemente bajas, un átomo de una molécula diatómica vibrante es un oscilador armónico simple en su estado de energía más bajo, ya que está ligado a otro átomo por una fuerza restauradora lineal. (La fuerza restauradora es lineal, al menos aproximadamente, ya que las

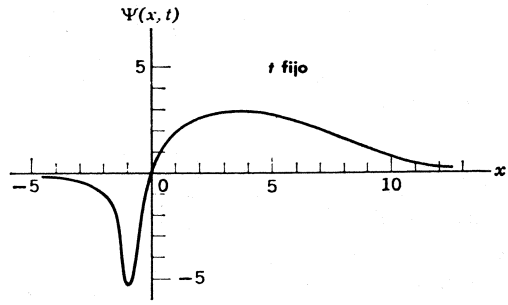


FIGURA 5-20
Dependencia espacial de una función de onda considerada en el problema 2, evaluada para cierto instante.

vibraciones moleculares son muy pequeñas). La constante de fuerza C para una molécula típica tiene un valor de aproximadamente $C \sim 10^3$nt/m. La masa del átomo es aproximadamente $m \sim 10^{-26}$ kg. (a) Utilice estos números para evaluar los límites del movimiento clásico a partir de la fórmula que aparece en el problema 3c. (b) Compare la distancia entre estos límites con las dimensiones de una molécula diatómica típica y comente lo que esta comparación implica en relación con el comportamiento de la molécula a temperaturas muy bajas.

7. Utilice la función de onda para la partícula en una caja verificada en el ejemplo 5-9, con el valor de A determinado en el ejemplo 5-10, para calcular la probabilidad de que la partícula asociada con la función de onda pueda ser encontrada en una medida dentro de una distancia de $a/3$ desde el extremo derecho de la caja de longitud a. La partícula está en su estado de energía más bajo. (b) Compare esto con la probabilidad que sería predicha por cálculos muy simples relacionados con lo hecho en el ejemplo 5-6.

8. Utilice los resultados del ejemplo 5-9 para estimar la energía total de un neutrón de masa aproximadamente 10^{-27} kg que se supone moviéndose libremente a través de un núcleo de dimensiones lineales de aproximadamente 10^{-14} m, pero que está estrictamente confinada al núcleo. Expresar la estimación en MeV. Esto estará muy próximo a la energía real de un neutrón en el estado de energía más bajo de un núcleo típico.

9. (a) Siguiendo el procedimiento del ejemplo 5-9, verificar que la función de onda

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A \operatorname{sen} \dfrac{2\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} & -a/2 < x < +a/2 \\ 0 & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \end{cases}$$

es una solución a la ecuación de Schrodinger en la región $-a/2 < x < +a/2$ para una partícula que se mueve libremente a través de la región pero que se encuentra estrictamente confinada a ella. (b) Determine también el valor de la energía total E de la partícula en el primer estado excitado del sistema y compárela con la energía total del estado base que se encontró en el ejemplo 5-9.(c) Graficar la dependencia espacial de esta función de onda. Compararla con la función de onda para el estado base de la figura 5-7 y dar un argumento cualitativo que relacione la diferencia en las dos funciones de onda con la diferencia en las energías totales de los dos estados.

10. (a) Normalizar la función de onda del problema 9 ajustando el valor de la constante multiplicativa A de modo que la probabilidad total de encontrar a la partícula asociada en alguna parte de la región de longitud a sea igual a uno. (b) Comparar con el valor de A que se obtuvo en el ejemplo 5-7 normalizando la función de onda del estado base. Discuta la comparación.

11. Calcular el valor de expectación de x y el valor de expectación de x^2 para la partícula asociada con la función de onda del problema 10.

12. Calcular el valor de expectación de p y el valor de expectación de p^2 para la partícula asociada con la función de onda del problema 10.

13. (a) Utilizar las cantidades calculadas en los dos problemas anteriores para calcular el producto de las incertidumbres en posición e impulso de la partícula en el primer estado excitado del sistema en consideración. (b) Comparar con la incertidumbre del producto cuando la partícula está en el estado de energía más bajo del sistema, obtenido en el ejemplo 5-10. Explicar por qué difieren las incertidumbres de los productos.

14. (a) Calcular los valores de expectación de la energía cinética y de la energía potencial para una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple, utilizando la función de onda del ejemplo 5-7. (b) Comparar con los promedios temporales de las energías cinética y potencial para un oscilador armónico simple clásico de la misma energía total.

15. Al calcular los valores de expectación del producto de la posición por el impulso, surge una ambigüedad debido a que no es trivial cuál de las dos expresiones

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi \, dx$$

$$\overline{px} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) x\Psi \, dx$$

se debe utilizar. (En la primera expresión $\partial/\partial x$ opera sobre Ψ; en la segunda opera sobre $x\Psi$.) (a) demostrar que ninguna es aceptable porque ambas violan el requisito, obvio de que $\overline{xp}$ debe ser real ya que es mensurable. (b) entonces, demuestre que la expresión

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left[\frac{x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) x}{2} \right] \Psi \, dx$$

es aceptable ya que satisface este requisito. (Sugerencia: (i) una cantidad es real si es igual a su propio complejo conjugado. (ii) Intente integrar por partes. (iii) En un caso real la función de onda se anulará siempre en $x = \pm\infty$.)

16. Demostrar por substitución directa en la ecuación de Schrödinger que la función de onda

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

satisface la ecuación si la eigenfunción $\psi(x)$ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial $V(x)$.

17. (a) Escribir la ecuación de onda clásica para una cuerda cuya densidad por unidad de longitud varía con x. (b) Separarla en dos ecuaciones diferenciales ordinarias y demostrar que la ecuación en x es muy similar a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

18. Utilizar una extensión del procedimiento que condujo a (5-31) y obtener la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m que se mueve en tres dimensiones (descritas por coordenadas rectangulares x, y, z).

19. (a) Separar la ecuación de Schrödinger del problema 18 para un potencial independiente del tiempo en una ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y una ecuación para la dependencia temporal de la función de onda. (b) Comparar las ecuaciones unidimensionales correspondientes (5-37) y (5-38) y explicar las similaridades y las diferencias.

20. (a) Separar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo del problema 19 en tres ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo, una en cada una de las coordenadas. (b) Compararlas con (5-37) (c) Explicar claramente qué se debe suponer acerca de la forma de la energía potencial para hacer posible la separación y cuál es el significado físico de esta suposición. (d) Dar un ejemplo de un sistema que pueda tener tal potencial.

21. Considere una partícula que se mueve bajo la influencia del potencial $V(x)=C\,|x|$, donde C es una constante, el potencial se ilustra en la figura 5-21. (a) Utilice argumentos cualitativos, muy similares a los del ejemplo 5-12, para hacer un esquema de las primeras eigenfunciones y de los diez eigenvalores para el sistema. (b) Hacer un esquema de las funciones de densidad de probabilidad correspondientes. (c) Utilizar la mecánica clásica para calcular, a la manera del ejemplo 5-6, las funciones densidad de probabilidad predichas por esa teoría. (d) Graficar las funciones densidad de probabilidad clásicas con las funciones densidad de probabilidad mecánico-cuánticas y discutir brevemente su comparación.

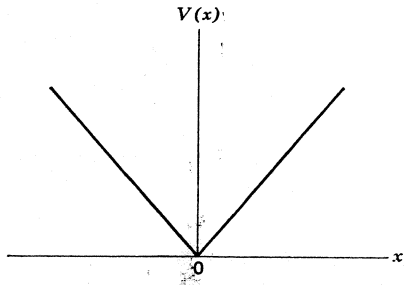


FIGURA 5-21
Función potencial considerada en el problema 21.

22. Considere una partícula que se mueve en el potencial $V(x)$ representado en la figura 5-22. Para los siguientes intervalos de la energía total E, establecer si existen algunos valores permitidos para E y, de haberlos, decir si ellos están separados discretamente o distribuidos de manera continua.(a) $E < V_0$, (b) $V_0 < E < V_1$, (c) $V_1 < E < V_2$, (d) $V_2 < E < V_3$, (e) $V_3 < E$.

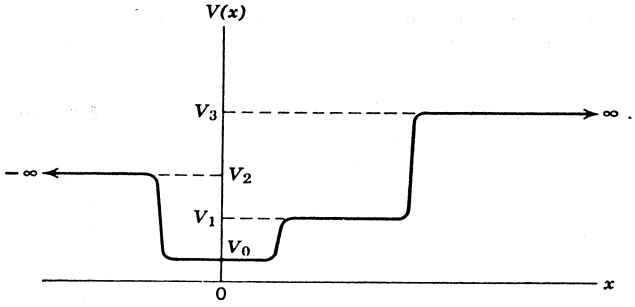


FIGURA 5-22
Función potencial considerada en el problema 22.

23. Considere una partícula que se mueve en el potencial $V(x)$ ilustrado en la figura 5-23, que tiene una región rectangular de profundidad V_0 y ancho a, en el cual se encuentra ligada la partícula. Estos parámetros están relacionados con la masa m de la partícula de tal manera que la energía permitida más baja E_1 se encuentra a una energía cercana a $V_0/4$ por encima del "fondo". Utilice argumentos cualitativos para graficar la forma aproximada de la eigenfunción correspondiente

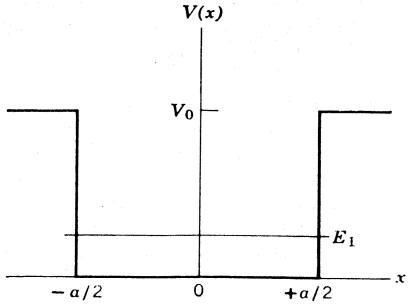


FIGURA 5-23
Función potencial considerada en el problema 23.

24. Supóngase que el fondo de la función potencial del problema 23 se cambia añadiendo una protuberancia en el centro de altura aproximada $V_0/10$ y ancho $a/4$. Esto es, suponga que ahora el potencial luce como la ilustración de la figura 5-24. Considere cualitativamente qué sucederá a la curvatura de la eigenfunción en la región de la protuberancia y cómo afectará ésta el problema de obtener un comportamiento aceptable de la eigenfunción en la región externa a la región ligante. A partir de estas consideraciones prediga cualitativamente qué le hará la protuberancia al valor de la energía más baja permitida E_1.

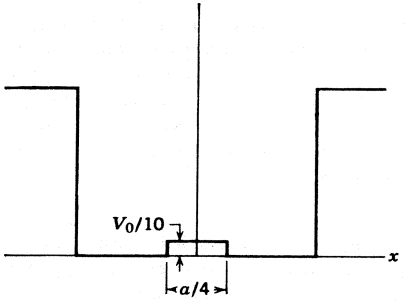


FIGURA 5-24
Protuberancia rectangular añadida al fondo del potencial de la figura 5-23.

25. Ya que la protuberancia en el problema 24 es pequeña, una buena aproximación a la energía más baja permitida de la partícula en presencia de la protuberancia se puede obtener tomándola como la suma de la energía en ausencia de la protuberancia más el valor de expectación de la energía potencial extra representada por la protuberancia, tomando la Ψ correspondiente al potencial sin protuberancia para calcular el valor de expectación. Utilizando este punto de vista, prediga si una protuberancia del mismo "tamaño" pero localizada en un extremo del fondo como en la figura 5-25 tendría un efecto mayor, menor o igual sobre la menor energía permitida para la partícula, comparado con el efecto de la protuberancia centrada. (Sugerencia: haga un bosquejo del producto de $\Psi^*\Psi$ y la función energía potencial que describe a la protuberancia centrada. A continuación considere cualitativamente el efecto sobre la integral de este producto, de mover al extremo la protuberancia.

26. Demuestre por substitución en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial ilustrado en la figura 5-23, que en la región a la derecha de la región de enlace la eigenfunción tiene la forma matemática

$$\psi(x) = Ae^{-[\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar]x} \qquad x > +a/2$$

27. Utilizando la densidad de probabilidad correspondiente a la eigenfunción del problema 26, escriba una expresión para estimar la distancia D externa a la región de enlace del potencial

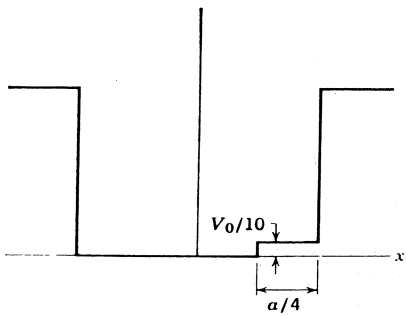


FIGURA 5-25
La misma protuberancia de la figura 5-24 pero movida al extremo del potencial.

dentro de la cual existe una gran probabilidad de encontrar a la partícula. (Sugerencia: considere que D se extiende hasta el punto en el cual $\Psi^*\Psi$ es menor que su valor en el extremo de la región de enlace por un factor de e^{-1}. Este criterio de e^{-1} es similar al que se utiliza en el estudio de los circuitos eléctricos).

28. El potencial ilustrado en la figura 5-23 da una buena descripción de las fuerzas que actúan sobre un electrón que se mueve a través de un bloque de metal. La diferencia de energía $V_0 - E$, para la energía del electrón más alta, es la función trabajo para el metal. Típicamente, $V_0 - E \simeq 5$ eV. (a) Utilice este valor para estimar la distancia D del problema 27. (b) Comente los resultados de la estimación.

29. Considere la eigenfunción mostrada en la parte superior de la figura 5-26. (a) ¿Cuál de los tres potenciales ilustrados en la parte inferior de la figura podría conducir a tal eigenfunción? Proporcione argumentos cualitativos para justificar su respuesta. (b) La eigenfunción mostrada no es la que corresponde al estado de energía más bajo permitido para el potencial. Haga un esquema de la forma de la eigenfunción que corresponde a la menor energía permitida. (c) En otro esquema indique el rango de energía en el que esperaría que los estados de energía estuvieran separados discretamente y el rango de energías en los que esperaría que las energías permitidas se encuentren distribuidas de manera continua.

30. (a) Utilice el procedimiento de integración numérica desarrollado en el apéndice F para encontrar el valor de la energía más baja permitida E_1 y la forma de la eigenfunción correspondiente $\psi_1(x)$, para una partícula de masa m que se mueve en el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases}$$

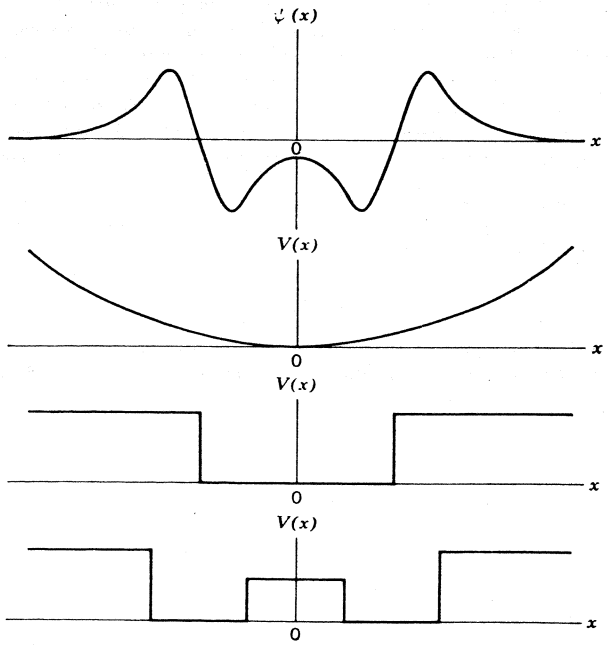


FIGURA 5-26

Una eigenfunción (curva superior) y tres posibles formas (curvas inferiores) para la función energía potencial considerada en el problema 29.

Como se demostró en el capítulo 6, puesto que $V(x)$ aumenta sin límite cuando x está fuera de la región de longitud a, la partícula está impedida de encontrarse fuera de esta región. Por lo tanto $\psi_1(x)$ se va a cero para $x = \pm a/2$. Argumentos de simetría muestran que para la función más baja $d\psi_1(x)/dx$ es cero para $x = 0$. (Sugerencia: en este problema no es posible definir al parámetro α pero es posible definir al parámetro C directamente en términos de E[1]) (b) Comparar el valor de E_1 que se obtuvo, con la solución exacta para este problema que se obtuvo analíticamente en el ejemplo 5-9.

31. Hacer el mismo cálculo indicado en el problema 30, excepto por un potencial que contiene una protuberancia rectangular de altura v_0 y ancho $a/2$ centrada en el fondo de la región de enlace. Esto es

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < -a/4 \text{ o } +a/4 < x < +a/2 \\ v_0 & -a/4 < x < +a/4 \end{cases}$$

Tome v_0 con el valor

$$v_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

En el problema 17 del capítulo siguiente se pregunta la solución analítica a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este potencial. (Sugerencia: a partir de consideraciones cualitativas del problema 24 se puede obtener una guía sobre la elección inicial apropiada para E_1).

32. Repetir la integración numérica del apéndice F para los valores supuestos de E de mayor energía y encontrar el primer estado excitado del potencial tratado ahí. (Sugerencia: (i) Para este estado $\psi = 0$ en $u = 0$. (ii) Tome $d\psi/du = +1$ en este punto, ya que la linealidad permite tener cualquier valor. (iii) La eigenfunción luce como una onda senoidal que llena la región del pozo).

33. Utilizando las primeras dos funciones de onda normalizadas $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ para una partícula que se mueve libremente en una región de longitud a, pero confinada estrictamente a esta región, construya la combinación lineal

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$$

Derive una relación que incluya las constantes ajustables c_1 y c_2 las cuales aseguran que $\Psi(x,t)$ también está normalizada. En el ejemplo 5-10 y en el problema 10 se han obtenido $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ normalizadas.

34. (a) Utilizando las funciones de onda "mezcladas" normalizadas del problema 33, calcular el valor de expectación de la energía total E de la partícula en términos de las energías E_1 y E_2 de los dos estados y de los valores c_1 y c_2 de los parámetros de mezcla. (b) Interpretar cuidadosamente el significado de su resultado.

35. Si la partícula descrita por la función de onda del problema 33 es un protón que se mueve en un núcleo, dará lugar a una distribución de carga que oscila en el tiempo con la misma frecuencia que las oscilaciones de su densidad de probabilidad. (a) Evaluar esta frecuencia para los valores de E_1 y E_2 correspondientes a una masa de protón de 10^{-27} kg y una dimensión nuclear de 10^{-14} m. (b) Evaluar también la frecuencia y la energía del fotón que emitiría esta distribución de carga oscilante cuando el protón cayera de su estado excitado a su estado base. (c) ¿En qué región del espectro electromagnético está este fotón?

6

Soluciones a las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo

6.1 Introducción 217

Papeles que desempeñan los potenciales ligados y no ligados.

6.2 El potencial cero 218

Movimiento clásico en el potencial; solución general de la ecuación; interpretación de las eigenfunciones y de las funciones de onda de ondas viajeras senoidales; normalización en una caja; grupo de ondas viajeras; ley de Newton a partir de la ecuación de Schrödinger.

6.3 El potencial escalón (energía menor que la altura del escalón). 224

Movimiento clásico; eigenfunción general para la región bajo el escalón; finitud; condiciones de continuidad en el escalón; coeficiente de reflexión; penetración bajo el escalón; límite clásico; distancias de penetración para partículas materiales y electrones de conducción.

6.4 El potencial escalón (energía mayor que la altura del escalón). 234

Movimiento clásico; ausencia de onda reflejada en la región sobre el escalón; condiciones de continuidad; coeficientes de reflexión y de transmisión; límite clásico; reflexión de un neutrón que penetra al núcleo.

6.5 Barrera de potencial 240

Movimientos clásicos; procedimientos para la solución; densidad de probabilidad de penetración de la barrera y coeficiente de transmisión; tunelaje y coeficiente de transmisión al pasar sobre la barrera; dispersión electrón-átomo, efecto Ramsauer y tamaños de las resonancias; comparación entre la barrera y el escalón; reflexión total interna frustrada y penetración de la barrera.

6.6 Ejemplos de penetración de barrera por partículas 247

Potencial partícula α -núcleo; emisión α ; teoría Gamow-Condon-Gurney del decaimiento α ; inversión de la molécula de amonio y relojes atómicos; diodos túnel.

6.7 Potencial de pozo cuadrado 251

Movimiento clásico; sistemas aproximados por un potencial; procedimientos para la solución; eigenvalores y eigenfunciones; límite clásico; el pozo cuadrado infinito como límite.

6.8 El potencial de pozo cuadrado infinito 257

Sistemas aproximados por un potencial; solución; eigenvalores; energía del punto cero y su relación con el principio de incertidumbre; eigenfunciones; aplicación directa de la relación de de Broglie; electrón ligado en el núcleo; paridad de las eigenfunciones; límite clásico.

6.9 El potencial de oscilador armónico simple 265

Vibraciones pequeñas; movimiento clásico; procedimiento para la solución; eigenvalores y energía del punto cero; eigenfunciones y paridad.

6.10 Resumen 269

Tabla de propiedades de los potenciales estudiados.

Preguntas 269

Problemas 271

6

Soluciones a las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo

6.1 Introducción

En este capítulo se analizarán muchas predicciones interesantes acerca de los fenómenos de la mecánica cuántica. También se estudiarán algunos de los experimentos que confirmaron estas predicciones y algunas de las aplicaciones prácticas e importantes de los fenómenos. Las predicciones se obtendrán de: resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para diferentes formas de la función de energía potencial $V(x)$, determinar las eigenfunciones, los eigenvalores, las funciones de onda y a continuación utilizar los procedimientos desarrollados en los capítulos anteriores para interpretar el significado físico de estas cantidades.

El enfoque será sistemático. Se empezará por tratar la forma más simple para el potencial, $V(x) = 0$. A continuación y en forma gradual se añadirá complejidad al potencial. Con cada nuevo potencial que se trate, el estudiante obtendrá una nueva visión de la mecánica cuántica y del comportamiento de los sistemas microscópicos. En este proceso el estudiante empezará a desarrollar una intuición para la mecánica cuántica, de la misma manera que desarrolló una intuición para la mecánica clásica mediante el uso repetido de la teoría.

Los potenciales considerados en las primeras secciones de este capítulo no tienen capacidad de ligar a una partícula, ya que no existe una región en la que tengan una depresión. A pesar de que en estos potenciales no se obtendrá una cuantización de la energía, se obtendrán otros fenómenos fundamentales. Además del hecho de que estos potenciales llenan de manera natural el inicio del enfoque sistemático existe otra razón para tratar primero a los potenciales no enlazantes y es que probablemente la mitad del trabajo *frecuente* que se realiza en la mecánica cuántica tiene que ver con partículas no ligadas.

Sin embargo, es cierto que la mayoría de las aplicaciones *iniciales* de la mecánica cuántica fueron sobre partículas ligadas. Muchos de los aspectos de la estructura de los átomos, moléculas y sólidos son ejemplos de problemas de partículas ligadas, lo mismo que muchos aspectos de la estructura nuclear. Ya que estos son los tópicos en los que nos concentraremos en los siguientes capítulos de este libro, algunos estudiantes (o instructores) preferirán ir directamente a la sección 6-7 que es el primer tratamiento de los potenciales enlazantes, o a la sección 6-8 que trata de un caso especial importante. Estas secciones son lo suficientemente autoconsistentes como para hacer los cortes mencionados sin mucha dificultad.

A través de este capítulo solamente se tratará con potenciales independientes del tiempo, ya que sólo para esos potenciales la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene significado. El análisis se restringirá a una sola dimensión ya que esto simplifica las matemáticas, permitiendo demostrar más de los interesantes fenómenos cuánticos. Excepciones obvias son los fenómenos que incluyen el impulso angular ya que éste no tiene significado en una

dimensión. Puesto que el impulso angular juega un papel preponderante en la estructura atómica, el capítulo siguiente comienza por extender este desarrollo de la mecánica cuántica a tres dimensiones.

6.2 El potencial cero

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo más simple es aquella en la cual $V(x) =$ constante. Una partícula que se mueve bajo la acción de tal potencial es una *partícula libre* ya que la fuerza que actúa sobre ella es $F = -dV(x)dx = 0$. Como esto es cierto sin importar el valor de la constante, no se pierde generalidad al escoger arbitrariamente la constante aditiva que aparece siempre en la definición de una energía potencial, de tal forma que se obtenga

$$V(x) = 0 \tag{6-1}$$

se sabe que en *mecánica clásica* una partícula libre debe estar o en reposo o en movimiento con impulso constante p. En cualquier caso su energía total E es una constante.

Para encontrar el comportamiento predicho por la *mecánica cuántica* para una partícula libre, se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-43), haciendo $V(x) = 0$. Con esta expresión para el potencial la ecuación es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \tag{6-2}$$

Las soluciones son las eigenfunciones $\psi(x)$, y las funciones de onda $\Psi(x,t)$ son, de acuerdo a (5-44)

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \tag{6-3}$$

Los eigenvalores E son iguales a la energía total de la partícula. Se sabe del análisis cualitativo de la sección 5-7 que para este potencial no enlazante y para cualquier valor de $E \geq 0$ existirá una solución aceptable de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Por supuesto que de los argumentos de plausibilidad que condujeron a la ecuación de Schrödinger ya se sabe una forma para la función de onda de una partícula libre. Esa función de onda (5-23) es

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i\,\mathrm{sen}(kx - \omega t)$$

Volviendo a escribirla como una exponencial compleja se tiene

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} \tag{6-4a}$$

El número de onda k y la frecuencia angular ω son

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \text{y} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar} \tag{6-4b}$$

Escribiendo la exponencial como el producto de dos factores

$$\Psi(x,t) = e^{ikx}e^{-i\omega t} = e^{ikx}e^{-iEt/\hbar}$$

Y comparándola con la forma general de la función de onda (6-3)

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Se obtiene

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{6-5}$$

Es decir, la exponencial compleja de (6-5) da la forma de una eigenfunción de una partícula libre que corresponde al eigenvalor E.

En forma más específica, ésta es una onda viajera eigenfunción de partícula libre, ya que la función de onda correspondiente $\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$, representa una onda viajera. Esto se puede ver, por ejemplo, del hecho de que los nodos de la parte real de la función de onda oscilatoria están localizados en posiciones en las que $kx - \omega t = (n + 1/2)\pi$, con $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ La razón es que la parte real de $\Psi(x,t)$, que es $\cos(kx - \omega t)$, tiene el valor cero siempre que $kx - \omega t = (n + 1/2)\pi$. Y por lo tanto los nodos ocurren siempre que $x = (n + 1/2)\pi/k + \omega t/k$ y puesto que los valores de x crecen al crecer t, los nodos viajan en la dirección en la que crece x. Esta conclusión se muestra en la parte superior de la figura 6-1 la cual muestra la gráfica de la parte real de $\Psi(x,t)$ para tiempos posteriores sucesivos. Para esta función de onda la densidad de probabilidad $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$, que se ilustra en la parte inferior de la figura 6-1 no tiene significado en cuanto al movimiento.

La intuición sugiere que para el mismo valor de E también deberá existir una función de onda que represente a una onda que viaja en la dirección en la que decrece x. El argumento anterior indica que esta función de onda deberá escribirse con el signo de kx invertido, es decir

$$\Psi(x,t) = e^{i(-kx-\omega t)} \tag{6-6}$$

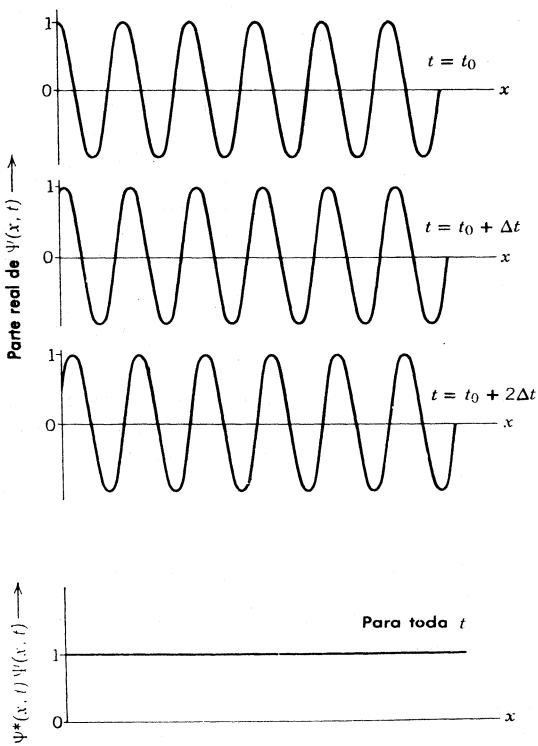


FIGURA 6-1

Arriba: Parte real, $\cos(kx - \omega t)$, de una exponencial compleja como función de onda viajera, $\Psi = e^{i(kx-\omega t)}$, para una partícula libre. Al aumentar el tiempo los nodos se mueven en la dirección en la que crece x. *Abajo:* Para esta función de onda no se ha convenido ningún sentido para el movimiento al representar la densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi = e^{-i(kx-\omega t)} e^{i(kx-\omega t)} = 1$ ya que es constante para toda t (y para toda x). Por supuesto que no es posible representar Ψ ya que es compleja.

La eigenfunción correspondiente será

$$\psi(x) = e^{-ikx} \qquad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{6-7}$$

Es fácil ver que esta eigenfunción también es solución de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para $V(x) = 0$. En efecto, cualquier combinación lineal arbitraria de las dos eigenfunciones (6-5) y (6-7), para el *mismo* valor de la energía total E, también es solución a la ecuación. Para probar esta afirmación se tomará la combinación lineal

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{6-8}$$

en la cual A y B son constantes arbitrarias y substituyéndola en la ecuación de Schroedinger independiente del tiempo (6-2). Puesto que

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = i^2k^2Ae^{ikx} + i^2k^2Be^{-ikx} = -k^2\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

la substitución en la ecuación conduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

y puesto que obviamente esta se satisface, la combinación lineal es una solución válida de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo.

La forma más general de la solución de una ecuación diferencial ordinaria (es decir, no parcial) que contenga una segunda derivada, tiene dos constantes arbitrarias. La razón es que para obtener la solución de esa ecuación hay que desarrollar dos integraciones sucesivas y en cada paso aparece una constante de integración. Los ejemplos más familiares al estudiante se encuentran en las soluciones generales de la ecuación de Newton del movimiento, las cuales tienen dos constantes arbitrarias tales como la posición y velocidad inicial. Puesto que la combinación lineal de (6-8) es una solución a (6-2) que contiene dos constantes arbitrarias es una solución *general*. La solución general es útil porque permite describir *cualquier* eigenfunción posible asociada con el eigenvalor E. Por ejemplo, si se hace $B = 0$ se obtiene una eigenfunción para una onda que viaja en la dirección en la que crece x. Si se hace $A = 0$ la onda viaja en la dirección en la que x decrece. Si se hace $|A| = |B|$, existen dos ondas que viajan en direcciones opuestas y que se combinan para formar una onda estacionaria. En la sección 6-3 se utilizarán eigenfunciones que son ondas estacionarias.

Considérese ahora la cuestión de dar interpretación física a las eigenfunciones y funciones de onda de la partícula libre. Tómese primero el caso de una onda que viaja en la dirección en la que crece x. La eigenfunción y la función de onda para este caso son

$$\psi(x) = Ae^{ikx} \qquad \text{y} \qquad \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{6-9}$$

Una conjetura obvia es que la partícula cuyo movimiento está descrito por estas funciones también viaja en la dirección en la que x crece. Para verificarlo, se calculará el valor de expectación del impulso p de la partícula. De acuerdo con la fórmula general para el valor de expectación (5-34)

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p_{\text{op}} \Psi \, dx$$

donde el operador para el impulso es

$$p_{op} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Ahora, para la función de onda en cuestión, se tiene

$$p_{op}\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar(ik)Ae^{i(kx-\omega t)} = +\hbar k\Psi = +\sqrt{2mE}\,\Psi$$

así

$$\bar{p} = +\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \sqrt{2mE}\,\Psi\, dx = +\sqrt{2mE}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi\, dx$$

La integral del segundo miembro es la densidad de probabilidad integrada sobre todo el eje x y es justamente la probabilidad de que la partícula se encuentre *en alguna parte,* lo cual deberá ser igual a uno. Por lo tanto, se obtiene

$$\bar{p} = +\sqrt{2mE}$$

Que es exactamente el impulso que debería esperarse para una partícula que se mueve en la dirección en la que crece x con una energía total E en una región de energía potencial cero.

Para el caso de una onda que viaja en la dirección en la que decrece x, la eigenfunción y la función de onda son

$$\psi(x) = Be^{-ikx} \quad \text{y} \quad \Psi(x,t) = Be^{i(-kx-\omega t)} \tag{6-10}$$

Cuando se opera sobre Ψ con p_{op}, se invierte el signo del término kx de la expresión anterior lo cual produce un signo cambiado en el resultado. Por lo tanto, se tiene el siguiente valor de expectación para el impulso.

$$\bar{p} = -\sqrt{2mE}$$

De esta manera, la función de onda y la eigenfunción se interpretan como descripción del movimiento de una partícula que se mueve en la dirección en la que decrece x con un impulso negativo y cuya magnitud es la que se esperaría en consideración a su energía.

Las eigenfunciones y las funciones de onda que se han considerado representan las situaciones *idealizadas* de una partícula en movimiento, en una dirección o en la otra, en un haz de longitud infinita. Su coordenada x es completamente desconocida debido a que las amplitudes de las ondas son las mismas en todas las regiones del eje x. Esto es, las densidades de probabilidad, por ejemplo

$$\Psi^*\Psi = A^*e^{-i(kx-\omega t)}Ae^{i(kx-\omega t)} = A^*A$$

son constantes independientes de x. En consecuencia, la partícula se encontrará igualmente en cualquier punto y la incertidumbre en su posición es $\Delta x = \infty$. El principio de incertidumbre establece que en esta situación es posible conocer con completa precisión el valor del impulso p de la partícula, por lo tanto

$$\Delta p\, \Delta x \geq \hbar/2$$

se puede satisfacer para una incertidumbre en su impulso de $\Delta p = 0$, si $\Delta x = \infty$. Los valores de p perfectamente precisos también están indicados por la relación de de Broglie, $p = \hbar k$, ya que

estas funciones de onda solamente contienen un solo valor del número de onda k. Puesto que existe una cantidad infinita de tiempo disponible para medir la energía de una partícula que viaja a través de un haz de longitud inifinita, el principio de incertidumbre energía-tiempo $\Delta E\,\Delta t \geq \hbar/2$ permite que su energía se conozca con completa precisión. Esto concuerda con la presencia de un solo valor de la frecuencia angular ω en estas funciones de onda, ya que la relación de Einstein-de Broglie $E = \hbar\omega$ muestra que esto significa un solo valor de la energía E.

Un ejemplo físico que se aproxima a la situación idealizada que representan estas funciones de onda sería el de un protón que se mueve en un haz altamente monoenergético que emerge de un ciclotrón. Estos haces se utilizan para estudiar la dispersión de protones por blancos de núcleos insertados en el haz. Desde el punto de vista del núcleo blanco y en términos de las distancias del orden de su radio nuclear r', la posición x de un protón en el haz será para todos los fines prácticos completamente desconocida, es decir $\Delta x \gg r'$. Entonces las funciones de onda de partícula libre (6-9) y (6-10) pueden dar una buena aproximación a la descripción del haz de protones en la región cercana al núcleo que nos interesa, en la que tiene lugar la dispersión. En otras palabras, en las proximidades del núcleo la función de onda (6-9)

$$\Psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

se puede usar para describir a un protón en un haz de un ciclotrón dirigido hacia donde crece x, tomando en cuenta que el haz es extremadamente largo comparado con las dimensiones del núcleo (condición que siempre se satisface en la práctica ya que los núcleos son extremadamente pequeños). La función de onda describe una partícula que se mueve con un impulso $p = \hbar k$ (preciso) y su energía total $E = \hbar\omega$, (precisa), donde estas cantidades están relacionadas por la ecuación $p = \sqrt{2mE}$ que es la de una partícula de masa m que se mueve en una región de energía potencial cero.

Existe una dificultad en cuanto a la normalización de las funciones de onda (6-9) y (6-10). Para tener, por ejemplo

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^*A\, dx = A^*A \int_{-\infty}^{\infty} dx = 1$$

la amplitud A deberá ser cero ya que $\int_{-\infty}^{\infty} dx$ tiene un valor infinito. La dificultad proviene de la aseveración irreal hecha por la función de onda acerca de que la partícula se puede encontrar con igual probabilidad en cualquier parte de un haz de longitud infinita. Lo cual nunca es cierto ya que los haces reales siempre tienen longitud finita. El haz de protones está limitado en un extremo por el ciclotrón y en el otro por una pared del laboratorio. No obstante que la incertidumbre Δx en la localización de un protón es mucho mayor que un radio nuclear r' no es mayor que la distancia L del ciclotrón a la pared. Esto es, si bien es cierto que $\Delta x \gg r'$ también lo es $\Delta x < L$. Lo cual sugiere que la normalización se puede obtener haciendo $\Psi = 0$ fuera del intervalo $-L/2 < x < +L/2$ o bien restringiendo x a este intervalo. En cualquier forma se obtiene una descripción más realista de la verdadera situación física y también es posible normalizar la función de onda con una amplitud A diferente de cero. Al procedimiento se le denomina *normalización en una caja*. Ignorando el hecho de que el valor de A que se obtiene depende de la longitud L de la caja, siempre resulta que los cálculos de una cantidad mensurable son independientes del valor utilizado para L. Además, se verá que por lo general no es necesario realizar la normalización en una caja debido a que las cantidades con interés físico se pueden expresar como relaciones en las cuales se cancela el valor de A.

La situación es completamente análoga a las que se encuentran comúnmente en la física clásica. Por ejemplo, al resolver un problema de electroestática se utiliza un alambre cargado de longitud infinita como aproximación de uno de longitud finita en el cual los "efectos de orilla" no son importantes. Esta idealización simplifica mucho la geometría del problema, pero implica la dificultad de que se requiere una cantidad de energía infinita para cargar al alambre infinitamente largo a menos que su densidad de carga sea cero. Sin embargo, usualmente es posible eliminar esta dificultad expresando las cantidades que interesan en términos de relaciones.

Es posible obtener un sentido mucho más realista del movimiento que el presentado en la igura 6-1 si se utiliza un número grande de funciones de onda de la forma de (6-9) como para generar un *grupo* de ondas viajeras. La figura 6-2 muestra la densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para un grupo particularmente simple, su movimiento es en la dirección en la que crece x, que es a dirección en la que crece el ancho del grupo. Para cualquier instante la localización del grupo se puede caracterizar por el valor de expectación x calculado de la densidad de probabilidad. La velocidad constante del grupo $d\bar{x}/dt$, es igual a la velocidad constante de la partícula libre $v = p/m = \sqrt{2mE}/m = \sqrt{2E/m}$, de acuerdo con las conclusiones del capítulo 3. El desvanecimiento del grupo es una propiedad característica de las ondas que está íntimamente relacionada con el principio de incertidumbre tal como se estudió en ese capítulo. Por supuesto que el comportamiento del grupo de funciones de onda es más fácil de interpretar que el comportamiento de una función de onda senoidal, tal como (6-9), ya que la densidad de probabilidad correspondiente es más aproximada a la descripción del movimiento de una partícula con el cual estamos familiarizados por la mecánica clásica. Sin embargo, las matemáticas necesarias para describir al grupo y tratar su comportamiento analíticamente son mucho más complicadas. La razón es que un grupo involucra necesariamente una distribución de números de onda k y por lo tanto una distribución de energías $E = \hbar^2k^2/2m$. Aún para componer un grupo simple como el mostrado en la figura, es necesario sumar de la manera descrita en el capítulo 3 un gran número de ondas senoidales con diferencias muy pequeñas en los números de onda o en las energías. Estas complicaciones matemáticas se ven contrapesadas por las ventajas de facilidad en la interpretación. Consecuentemente, rara vez se utilizan estos grupos para realizar cálculos prácticos en la mecánica cuántica y la mayoría de ellos se realizan con funsiones de onda que contienen un solo número de onda y una sola energía.

Las consideraciones del movimiento del grupo de la figura 6-2 nos llevan a estudiar brevemente un caso relacionado que es de gran interés. Si en vez de tener un valor constante igual a cero la función potencial $V(x)$ cambia tan lentamente que su valor es casi constante sobre una distancia del orden de la longitud de onda de de Broglie de la partícula, la función de onda del grupo se propagará en una manera similar a la ilustrada en la figura pero ahora la velocidad del grupo también cambiará lentamente. Comenzando con la ecuación de Schrö-

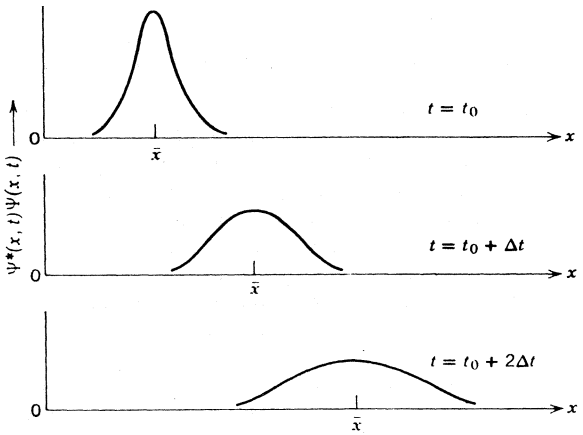


FIGURA 6-2
La densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para una función de onda viajera de una partícula libre. Cuando el tiempo aumenta el grupo se mueve en la dirección en la que crece x y también se desvanece.

dinger los cálculos conducen a una expresión que relaciona el cambio en la velocidad del grupo, $d\bar{x}/dt$, con el cambio en el potencial $V(x)$. La expresión es

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{d\bar{x}}{dt}\right) = \overline{\frac{d}{dx}\left(-\frac{V(x)}{m}\right)}$$

o

$$\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} = \frac{-\overline{\frac{dV(x)}{dx}}}{m} = \frac{\overline{F(x)}}{m}$$

donde las barras denotan los valores de expectación y $F(x)$ es la fuerza que corresponde al potencial $V(x)$. Es una desgracia que los cálculos sean tan complicados como para reproducirlos aquí. Son muy significativos ya que muestran que la aceleración promedio de la partícula asociada con la función de onda del grupo que es igual a la fuerza promedio que actúa sobre la partícula dividida entre su masa. Esto es, la ecuación de Schrödinger conduce al resultado de que una partícula de un sistema microscópico obedece, en promedio, la ley de Newton del movimiento. Las fluctuaciones de su comportamiento promedio reflejan el principio de incertidumbre y son muy importantes en el límite microscópico. Pero estas fluctuaciones resultan despreciables en el límite macroscópico donde el principio de incertidumbre no trae consecuencias consigo y no es necesario el seguir hablando de promedios alrededor de la localización. Igualmente, en el límite macroscópico cualquier potencial realista cambia solamente una cantidad pequeña en una distancia tan corta como una longitud de onda de de Broglie. Por lo tanto, en este límite, tampoco es necesario hablar de promedios cuando se estudian los potenciales. Entonces, en el límite macroscópico se pueden ignorar las barras que representan los valores de expectación o promedios en las ecuaciones anteriores. Entonces se concluye que las *leyes de Newton del movimiento se pueden derivar de la ecuación de Schrödinger en el límite clásico de sistemas macroscópicos. La ley de Newton del movimiento es un caso especial de la ecuación de Schrödinger* .

6.3 El potencial escalón (energía menor que el alto del escalón)

En las secciones siguientes se estudiarán las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula cuya energía potencial se puede representar por una función $V(x)$ que tiene valores distintos en cada uno de los diferentes intervalos del eje x. Los valores de estos potenciales cambian abruptamente al pasar de un intervalo al siguiente. Claro que este tipo de potenciales que cambian abruptamente (es decir, son funciones discontinuas de x) no existen en la naturaleza. Sin embargo, estos potenciales idealizados se usan frecuentemente en la mecánica cuántica para aproximar situaciones reales ya que, al ser constantes en cada intervalo, son fáciles de tratar matemáticamente. Los resultados que se obtendrán de estos potenciales nos servirán para ilustrar un número de fenómenos característicos de la mecánica cuántica.

Una analogía, que seguramente resultará familiar al estudiante se encuentra en el procedimiento utilizado en el estudio del electromagnetismo el cual involucra el tratamiento de muchos sistemas idealizados como el alambre infinito, el capacitor sin orillas etc. Estos sistemas se estudian porque son relativamente fáciles de tratar, porque son excelentes aproximaciones a los reales y porque los sistemas reales usualmente son complicados para tratarlos matemáticamente ya que tienen geometrías complicadas. Los potenciales idealizados que se tratan en este capítulo se usan en la misma forma y con la misma justificación.

El caso más simple es el *potencial escalón* que se ilustra en la figura 6-3. Si se escoge el origen del eje x en el escalón y a la constante arbitraria aditiva que siempre aparece en la definición del potencial de tal manera que la energía potencial de la partícula sea cero cuando ésta se encuentre a la izquierda del escalón; $V(x)$ se puede escribir

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \tag{6-11}$$

donde V_0 es una constante. Se puede pensar en $V(x)$ como una representación aproximada de la función energía potencial para una partícula cargada que se mueve a lo largo del eje de un sistema de dos electrodos, separados por una brecha muy pequeña, y que se mantienen a voltajes diferentes. La mitad superior de la figura 6-4 ilustra este sistema y la mitad inferior ilustra la función energía potencial correspondiente. Conforme decrece la brecha, la función potencial se aproxima a la idealización que se ilustra en la figura 6-3. En el ejemplo 6-2 se verá que la energía potencial para un electrón que se mueve cerca de la superficie de un metal es muy parecida a un potencial escalón ya que crece muy rápidamente en la superficie desde un valor interior esencialmente constante hasta un valor exterior constante mucho mayor.

Supóngase que una partícula de masa m y energía total E se encuentra en la región $x < 0$, y que se mueve hacia el punto $x = 0$ en el cual el potencial escalón $V(x)$ cambia su valor en forma brusca. Según la mecánica clásica la partícula se moverá libremente en esta región hasta que alcance $x = 0$, donde estará sujeta a una fuerza impulsiva $F = -dV(x)/dx$ que actúa en la dirección en la que x decrece. El potencial idealizado (6-11) implica una fuerza impulsiva de magnitud infinita y que actúa solamente en el punto $x = 0$. Sin embargo, como esta fuerza actúa sobre la partícula solamente por un tiempo infinitesimal, la cantidad $\int F\,dt$ (la impulsión) que determina el cambio en su impulso, es finita. De hecho, el cambio en el impulso no se ve afectado por la idealización.

En la mecánica clásica, el movimiento que sigue a la acción de la fuerza en $x = 0$, depende de la relación entre E y V_0. Lo cual también es cierto en la mecánica cuántica. En esta sección se trata el caso en el que $E < V_0$, es decir, cuando la energía total es menor que la altura del escalón

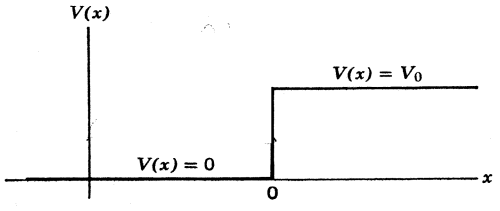


FIGURA 6-3
Un potencial escalón.

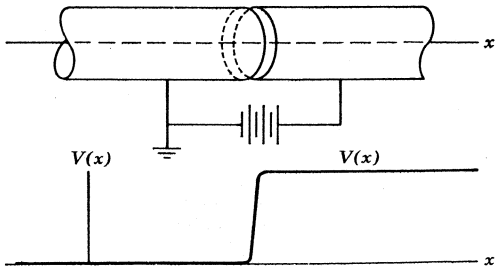


FIGURA 6-4
Ilustración de un sistema físico en el que la función energía-potencial se puede aproximar por un potencial escalón. Una partícula cargada se mueve a lo largo del eje de dos electrodos cilíndricos que se mantienen a voltajes diferentes. En el interior de cualesquiera de los electrodos su energía potencial es constante, pero cambia muy rápidamente cuando se pasa de uno a otro.

potencial, tal y como se ilustra en la figura 6-5. (El caso en el que $E > V_0$ se tratará en la siguiente sección). Ya que la energía total E es una constante, la *mecánica clásica* predice que la partícula no puede entrar en la región $x > 0$. La razón es que en esta región

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x)$$

o

$$\frac{p^2}{2m} < 0$$

Entonces la energía cinética $p^2/2m$ sería negativa en la región $x > 0$, lo que conduciría a un valor imaginario para el impulso lineal p en esta región. Lo cual no está permitido ni tiene sentido físico en la mecánica clásica, según la cual, la fuerza impulsiva cambiará el impulso de la partícula en tal forma, que ésta invierta su movimiento y viaje en la dirección en la que x decrece con el impulso en la dirección opuesta a su impulso inicial. La magnitud del impulso p será la misma antes y después de la inversión puesto que la energía total $E = p^2/2m$ es constante.

Según la *mecánica cuántica*, para determinar el movimiento de la partícula habrá de determinarse la función de onda que es solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial escalón de la ecuación (6-11) con la energía total $E < V_0$. Puesto que este potencial es independiente del tiempo, el problema real por resolver es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Del análisis cualitativo del capítulo anterior se sabe que existirá una solución aceptable para *cualquier* valor de $E \geq 0$, ya que el potencial no puede ligar a la partícula a un intervalo limitado del eje x.

Para el potencial escalón, el eje x se divide en dos regiones, en la región en la que $x < 0$ (a la izquierda del escalón), se tiene $V(x) = 0$, de manera que la eigenfunción que dará información sobre el comportamiento de la partícula es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \qquad x < 0 \quad (6\text{-}12)$$

En la región en la que $x > 0$ (a la derecha del escalón), se tiene $V(x) = V_0$, y la eigenfunción es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo la cual es casi tan simple como la anterior

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) \qquad x > 0 \quad (6\text{-}13)$$

Estas dos ecuaciones se resuelven por separado y, por lo tanto, se habrá de construir una eigenfunción válida para el intervalo completo de x uniendo las dos soluciones en $x = 0$, de tal

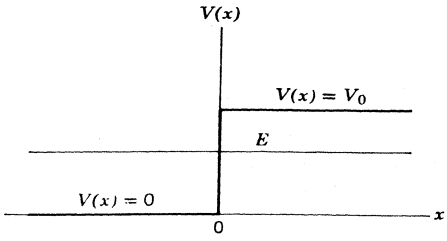


FIGURA 6-5

Relación entre las energías potencial y total para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total menor que la altura del escalón.

manera que satisfagan los requisitos mencionados en la sección 5-6, es decir, que la eigenfunción y su primera derivada sean finitas en todas partes, monovaluadas y continuas.

Considérese la ecuación diferencial (6-12) que es válida para la región en la cual $V(x) = 0$. Ya que esta es precisamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula libre, se toma como su solución *general* la eigenfunción (6-8), que es una onda viajera que se escribe como

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad x < 0 \quad (6\text{-}14)$$

Considérese enseguida la ecuación diferencial (6-13) que es válida para la región en la cual $V(x)=V_0$. De las consideraciones cualitativas de la sección 5-7 no es de esperarse que una función oscilatoria como la (6-14) sea solución, ya que en la región de interés la energía total E es menor que la energía potencial V_0. De hecho, aquellas consideraciones afirmaban que la solución era una función que se aproxima "gradualmente al eje x". La función más simple con esta propiedad es la exponencial *real* decreciente, que se puede escribir

$$\psi(x) = e^{-k_2x} \qquad x > 0 \quad (6\text{-}15)$$

Veamos si esta es una solución y de serlo se determinará el valor requerido de k_2; para esto se substituirá en (6-13), que debe satisfacer supuestamente. Primero se evalúa

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (-k_2)^2e^{-k_2x} = k_2^2\psi(x)$$

Y substituyendo, resulta

$$-\frac{\hbar^2}{2m}k_2^2\psi(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

Que satisface la ecuación y por lo tanto verifica la solución, proporcionando:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \qquad E < V_0 \quad (6\text{-}16)$$

La solución que se ha verificado no es una solución *general* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-13). La razón es que la ecuación contiene una segunda derivada, de modo que la solución general deberá contener dos constantes arbitrarias. Sin embargo, si se encuentra una solución a la ecuación para el mismo valor de E y resulta diferente de la solución encontrada anteriormente es posible hacer una combinación lineal arbitraria de estas soluciones *particulares*. La combinación lineal también será solución y puesto que contiene dos constantes arbitrarias será una solución general.

Es posible encontrar la forma de otra solución particular observando que k_2 interviene en la ecuación (6-16) como un cuadrado. Por lo tanto, el signo resulta intrascendente y la exponencial creciente

$$\psi(x) = e^{+k_2x} \qquad \text{donde } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \qquad x > 0 \quad (6\text{-}17)$$

también será solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que se ha tratado. Lo cual es igualmente fácil de verificar por substitución en la ecuación. En vez de esto, se verifica que la combinación lineal arbitraria de las dos soluciones particulares

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \qquad \text{donde } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \qquad x > 0 \quad (6\text{-}18)$$

es una solución de (6-13), con C y D las dos constantes arbitrarias. Calculando

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = Ck_2^2e^{k_2x} + D(-k_2)^2e^{-k_2x} = k_2^2\psi(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x)$$

y substituyendo el resultado en la ecuación, obteniendo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

Ya que obviamente esto se satisface, se verifica que (6-18) es una solución. Puesto que contiene dos constantes arbitrarias, es la solución *general* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la región del potencial escalón en la que $V(x) = V_0$, con $E < V_0$. Aunque la parte de la exponencial creciente no se usará en esta sección, sí se usará en las siguientes.

Las constantes arbitrarias A, B, C y D de (6-14) y (6-18) se deben escoger de modo que las eigenfunciones satisfagan los requisitos siguientes: ser finitas, monovaluadas y continuas; requisitos de $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$. Primero considérese el comportamiento de $\psi(x)$ cuando $x \to +\infty$. En esta región del eje x la forma general de $\psi(x)$ está dada por (6-18). Mediante inspección es posible ver que $\psi(x)$ generalmente aumenta sin límite conforme $x \to +\infty$, debido a la presencia del primer término Ce^{k_2x}. Para prevenir esto y mantenerla finita, se deberá tomar el coeficiente arbitrario C del primer término igual a cero.

$$C = 0 \tag{6-19}$$

Estas funciones satisfacen de manera automática la condición de ser monovaluadas. Para estudiar su continuidad considérese el punto $x = 0$. En este punto las dos formas de $\psi(x)$, dadas por (6-14) y (6-18), se deben unir de modo tal que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas. La continuidad de $\psi(x)$ se obtiene satisfaciendo la relación

$$D(e^{-k_2x})_{x=0} = A(e^{ik_1x})_{x=0} + B(e^{-ik_1x})_{x=0}$$

que proviene de igualar las dos formas en $x = 0$; relación que conduce a

$$D = A + B \tag{6-20}$$

La continuidad de la derivada de las dos formas

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -k_2De^{-k_2x} \qquad x > 0$$

y

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = ik_1Ae^{ik_1x} - ik_1Be^{-ik_1x} \qquad x < 0$$

se obtiene igualando estas derivadas en $x = 0$.

$$-k_2D(e^{-k_2x})_{x=0} = ik_1A(e^{ik_1x})_{x=0} - ik_1B(e^{-ik_1x})_{x=0}$$

que conduce a

$$\frac{ik_2}{k_1}D = A - B \tag{6-21}$$

Sumando (6-20) y (6-21) se tiene

$$A = \frac{D}{2}\left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) \tag{6-22}$$

Y restándolas

$$B = \frac{D}{2}\left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) \tag{6-23}$$

Con lo que se ha determinado A, B y C en términos de D y por lo tanto la eigenfunción para el potencial escalón y para la energía $E < V_0$, es

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2}(1 + ik_2/k_1)e^{ik_1x} + \frac{D}{2}(1 - ik_2/k_1)e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ De^{-k_2x} & x \geq 0 \end{cases} \tag{6-24}$$

La constante arbitraria que resta, D, determina la amplitud de la eigenfunción pero no interviene en ninguna de sus características más importantes. La presencia de esta constante refleja el hecho de que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es lineal en $\psi(x)$, y por lo tanto están permitidas soluciones de cualquier amplitud. Posteriormente se verá que usualmente es posible obtener resultados útiles sin molestarse en efectuar el procedimiento de normalización que especificaría a D. La razón es que las cantidades mensurables que se obtendrán como predicciones de la teoría contienen a D tanto en el numerador como en el denominador de una relación, de modo que se cancela.

La función de onda correspondiente a la eigenfunción es

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{ik_1x}e^{-iEt/\hbar} + Be^{-ik_1x}e^{-iEt/\hbar} = Ae^{i(k_1x - Et/\hbar)} + Be^{i(-k_1x - Et/\hbar)} & x \leq 0 \\ De^{-k_2x}e^{-iEt/\hbar} & x \geq 0 \end{cases} \tag{6-25}$$

Considérese la región $x < 0$. Para esta región el primer término en la función de onda es una onda viajera que se propaga en la dirección en la que crece x y que describe una partícula que se mueve en la misma dirección. El segundo término en la función de onda para $x < 0$ es una onda que se propaga en la dirección en la que decrece x y describe a una partícula que se mueve en esta dirección. Esta información sumada a las predicciones clásicas descritas con anterioridad sugieren que se podría asociar el primer término con la incidencia de la partícula sobre el potencial escalón y al segundo con la reflexión de la partícula por éste. Utilizando esta asociación para calcular la probabilidad de que la partícula incidente sea reflejada y llamémosla *coeficiente de reflexión* R. Obviamente, R depende de la relación B/A que especifica la amplitud de la parte reflejada de la función de onda con relación a la amplitud de la parte incidente. Pero en mecánica cuántica las probabilidades dependen de las intensidades, tales como B^*B y A^*A, y no de las amplitudes. Por lo tanto R se deberá evaluar a partir de la fórmula

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} \tag{6-26}$$

Esto es, el coeficiente de reflexión es igual a la relación de la intensidad de la parte de la onda que describe a la partícula reflejada a la intensidad que describe a la partícula incidente. Se obtiene

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \frac{(1 - ik_2/k_1)^*(1 - ik_2/k_1)}{(1 + ik_2/k_1)^*(1 + ik_2/k_1)}$$

o

$$R = \frac{(1 + ik_2/k_1)(1 - ik_2/k_1)}{(1 - ik_2/k_1)(1 + ik_2/k_1)} = 1 \qquad E < V_0 \quad (6\text{-}27)$$

El hecho de que esta razón sea igual a uno significa que una partícula que incide sobre el potencial escalón, con energía total menor que la altura del escalón, tiene una probabilidad de ser reflejada igual a uno, es decir, siempre se refleja. Lo cual concuerda con las predicciones de la mecánica clásica.

Considérense ahora las eigenfunciones de (6-24). Utilizando la relación

$$e^{ik_1x} = \cos k_1x + i \operatorname{sen} k_1x \qquad (6\text{-}28)$$

es fácil demostrar que la eigenfunción se puede expresar como

$$\psi(x) = \begin{cases} D \cos k_1x - D\dfrac{k_2}{k_1} \operatorname{sen} k_1x & x \leq 0 \\ De^{-k_2x} & x \geq 0 \end{cases} \qquad (6\text{-}29)$$

Si se genera la función de onda multiplicando $\psi(x)$ por $e^{-iEt/\hbar}$, es muy fácil ver que lo que se tiene es una onda estacionaria ya que la localización de los nodos no cambia con el tiempo. En este problema las ondas viajeras incidente y reflejada se combinan para formar una onda estacionaria para $x < 0$ ya que son de igual intensidad. En la figura 6-6 se muestra esto de manera esquemática.

En la parte superior de la figura 6-7 se muestra la función de onda mediante la gráfica de la eigenfunción (6-29) que es una función real de x si se toma a D real. Se puede pensar que la función de onda es una función oscilante en el tiempo según $e^{-iEt/\hbar}$ y con una amplitud cuya dependencia espacial está dada por $\psi(x)$. Aquí se encuentra un detalle que constituye un

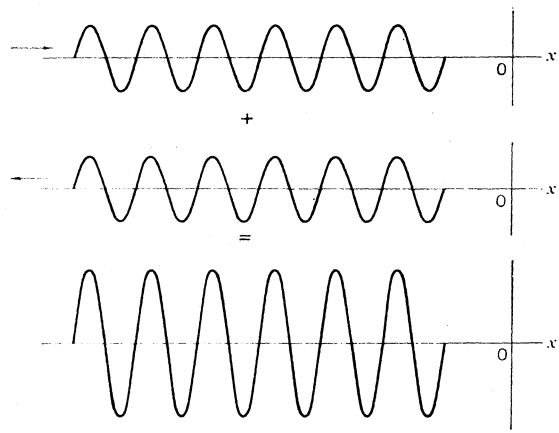


FIGURA 6-6

Ilustración esquemática de la combinación de una onda incidente y una reflejada de intensidades iguales para formar una onda estacionaria. La función de onda se ve reflejada en $x = 0$ por un potencial escalón. Observe que los nodos de las ondas viajeras se mueven a derecha e izquierda pero los de la onda estacionaria están estacionarios.

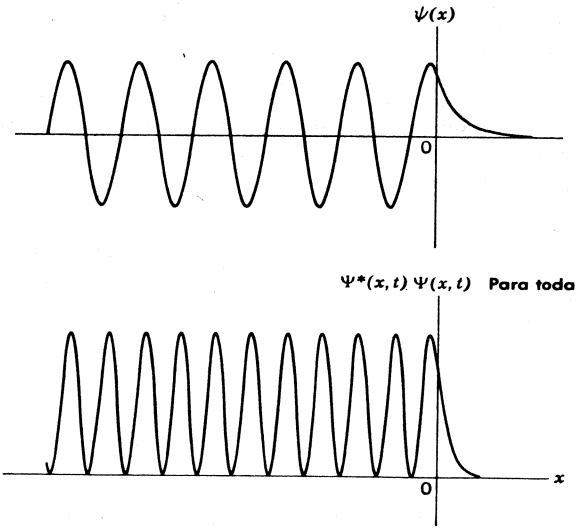


FIGURA 6-7

Arriba: Eigenfunción $\psi(x)$ para una partícula que incide en $x = 0$ sobre un potencial escalón con energía total menor que la altura del escalón. Observe la penetración de la eigenfunción en la región clásicamente excluida $x > 0$. *Abajo:* Densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi = \psi^*\psi = \psi^2$ correspondiente a esta eigenfunción. Los espacios entre los picos de ψ^2 son dos veces menores que los que existen entre los picos de ψ.

contraste profundo con las predicciones clásicas. Si bien en la región $x > 0$ la densidad de probabilidad

$$\Psi^*\Psi = D^*e^{-k_2x}e^{+iEt/\hbar}De^{-k_2x}e^{-iEt/\hbar} = D^*De^{-2k_2x} \tag{6-30}$$

que se ilustra en la parte inferior de la figura 6-7, decrece rápidamente conforme crece x, *existe* una probabilidad finita de que la partícula se encuentre en la región $x > 0$. En la mecánica clásica sería absolutamente imposible encontrar la partícula en esta región ya que la energía total es menor que la energía potencial de modo que la energía cinética $p^2/2m$ es negativa y el impulso p es imaginario. Este fenómeno, llamado *penetración de la región clásicamente excluida,* es una de las predicciones más impresionantes de la mecánica cuántica.

Posteriormente se discutirán ciertos experimentos que confirman esta predicción pero aquí se harán algunas observaciones al respecto. Una es que la penetración *no* significa que la partícula quede almacenada en la región clásicamente excluida ya que, como se ha visto, la partícula incidente es, en definitiva, reflejada por el escalón.

Otro punto es que la penetración de la región excluida, la cual obedece (6-30), *no* está en conflicto con los experimentos de la mecánica clásica. De la misma ecuación se ve que la probabilidad de encontrar a la partícula con una coordenada $x > 0$ solamente es apreciable en una región que principia en $x = 0$ y se extiende en una *distancia de penetración* Δx que es igual a $1/k_2$. La razón es que e^{-2k_2x} se va muy rápidamente a cero cuando x es mucho más grande que $1/k_2$. Puesto que $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, se tiene

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

En el límite clásico el producto de m y $(V_0 - E)$ es tan grande, comparado con $\hbar^2$ que Δx es inconmensurablemente pequeña.

Ejemplo 6-1. Estimar la distancia de penetración Δx para una partícula de polvo muy pequeña, de radio $r = 10^{-6}$ m y densidad $\rho = 10^4$ kg/m^3 que se mueve a la velocidad (muy pequeña) $v = 10^{-2}$ m/seg, si la partícula golpea en la región de la izquierda de un potencial escalón de altura igual al doble de la energía cinética de la partícula.

La masa de la partícula es

$$m = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho \simeq 4 \times 10^{-18}\,\text{m}^3 \times 10^4\,\text{kg/m}^3 = 4 \times 10^{-14}\,\text{kg}$$

Su energía cinética antes de pegar sobre el escalón es

$$\frac{1}{2}mv^2 \simeq \frac{1}{2} \times 4 \times 10^{-14}\,\text{kg} \times 10^{-4}\,\text{m}^2/\text{seg}^2 = 2 \times 10^{-18}\,\text{joule}$$

que también es el valor de $(V_0 - E)$. La distancia de penetración es

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \simeq \frac{10^{-34}\,\text{joule-seg}}{\sqrt{2 \times 4 \times 10^{-14}\,\text{kg} \times 2 \times 10^{-18}\,\text{joule}}}$$

$$\simeq 2 \times 10^{-19}\,\text{m}$$

Por supuesto que esto es menor que lo que es posible detectar en cualquier experimento en muchos órdenes de magnitud. Para las partículas con más masa y energías mayores como las utilizadas en la mecánica clásica, Δx es aún menor. ◀

Además, nos gustaría apuntar que el principio de incertidumbre demuestra que las propiedades ondulatorias exhibidas por un ente al penetrar a la región excluida clásicamente *no* están en conflicto con sus propiedades de partícula. Considérese un experimento capaz de demostrar que la partícula está localizada en alguna parte de la región $x > 0$. Puesto que la densidad de probabilidad para $x > 0$ solamente es apreciable en un intervalo de longitud Δx, el experimento tratará de localizar la partícula dentro de este intervalo; al hacerlo necesariamente se llega a una incertidumbre Δp en el impulso, la cual deberá ser al menos tan grande como

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

Consecuentemente, la energía de la partícula es incierta por una cantidad

$$\Delta E \simeq \frac{(\Delta p)^2}{2m} \simeq V_0 - E$$

y ya no es posible decir que la energía total E de la partícula es definitivamente menor que la energía potencial V_0. Esto hace desaparecer el conflicto mencionado.

La penetración de la región clásicamente excluida *puede* conducir a consecuencias mensurables. Esto se verá posteriormente para un potencial que primero se eleva a una altura $V_0 > E$ pero que permanece en este valor sólo por una distancia no mucho mayor que la distancia de penetración Δx para después descender. De hecho, el fenómeno tiene consecuencias prácticas importantes. Un ejemplo, al cual nos referiremos muy pronto, es el diodo túnel que se utiliza en la electrónica moderna.

Ejemplo 6-2. Dentro de un bloque de *Cu* se mueve un electrón de conducción con una energía total E bajo la influencia de un potencial que, con una buena aproximación, tiene un valor constante igual a cero dentro del bloque y cambia bruscamente al valor constante $V_0 > E$ fuera del bloque. El valor del potencial en el interior es esencialmente constante y se puede considerar como cero ya que un electrón de conducción en el interior del metal experimenta una fuerza de Coulomb neta sumamente pequeña, ya que la distribución de carga que le rodea es aproximadamente uniforme. El potencial aumenta muy rápidamente en la superficie del metal hasta alcanzar el valor exterior V_0 debido a que el electrón experimenta una fuerza intensa ejercida por la distribución de carga no uniforme presente en esta región. Esta fuerza tiende a regresar el electrón al metal y por lo tanto es la que causa que el electrón de conducción esté ligada este mismo. Puesto que el electrón está ligado, V_0 deberá ser mayor que su energía total E. El valor del potencial exterior es constante si el metal no tiene carga total, ya que fuera de éste el electrón no sentirá ninguna fuerza. La masa del electrón es $m = 9 \times 10^{-31}$ kg. Las medidas de la energía necesaria para quitar de manera permanente al electrón del bloque, es decir, las medidas de la función de trabajo, demuestran que $V_0 - E = 4\ eV$. De estos datos se puede estimar la distancia Δx que el electrón puede penetrar en la región clásicamente excluida en el exterior del bloque.

En el sistema mks,

$$V_0 - E = 4\,\text{eV} \times \frac{1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule}}{1\,\text{eV}} \simeq 6 \times 10^{-19}\,\text{joule}$$

Así que

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

$$\simeq \frac{10^{-34}\,\text{joule-seg}}{\sqrt{2 \times 9 \times 10^{-31}\,\text{kg} \times 6 \times 10^{-19}\,\text{joule}}} \simeq 10^{-10}\,\text{m}$$

La distancia de penetración es del orden de las dimensiones atómicas. Por lo tanto el efecto puede tener consecuencias en los sistemas atómicos. Como se verá en breve, ciertamente el efecto es muy importante en circunstancias determinadas. ◀

Por último, se apuntará que la penetración de la región clásicamente excluida no es clásica en el sentido de que un ente que es clásico no se comporta como *tal*. Si no que se comporta como una *onda* clásica ya que, como se verá posteriormente, el fenómeno es bien conocido con las ondas luminosas desde el tiempo de Newton. La penetración por partículas materiales de la región clásicamente excluida es otra manifestación de la naturaleza ondulatoria de las partículas.

La figura 6-8 muestra la densidad de probabilidad para una función de onda en la forma de un *grupo* para el problema de una partícula que incide en la dirección en la que crece x sobre un potencial escalón con un valor promedio de la energía total menor que la altura del escalón. La función de onda se puede obtener sumando un número muy grande de funciones de onda de la forma (6-25) sobre la energía total E. También se puede obtener por una solución numérica directa de la ecuación de Schrödinger. Como se puede suponer de las complicaciones indicadas en la figura, cualesquiera de estos procedimientos involucran una gran cantidad de trabajo con computadoras de alta velocidad. Los resultados de estos cálculos ciertamente contienen un sentido realista del movimiento de la partícula, pero obsérvese que estos resultados muestran que la partícula asociada con la función de onda reflejada por el escalón tiene probabilidad uno y existe algo de penetración de la región clásicamente excluida. El hecho que se puede aprender de estos resultados básicos provenientes de cálculos simples que involucran solamente a la función de onda (6-25) que contiene un solo valor de E es que por lo general en la mecánica cuántica no es necesario utilizar funciones de onda en la forma de grupos. Por supuesto que se deberá intentar el aprender la manera de interpretar las funciones de onda simples.

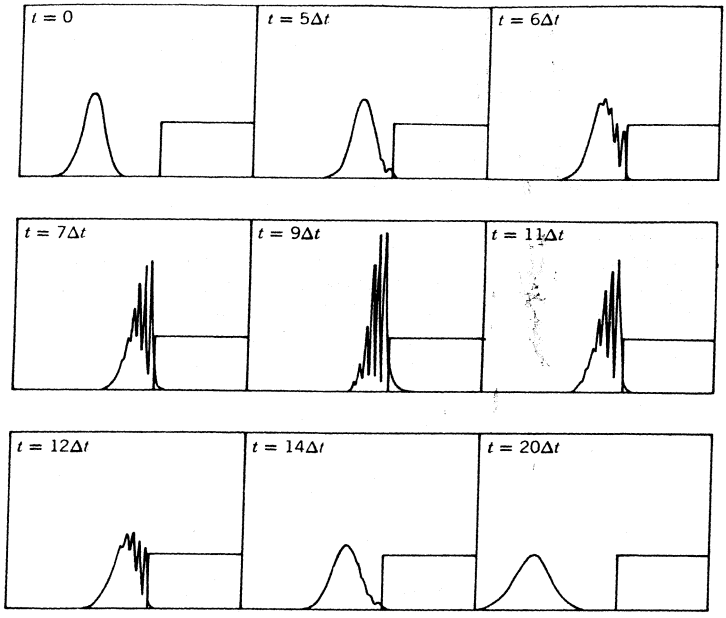


FIGURA 6-8

Un potencial escalón y la densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para un grupo de funciones de onda que describen a una partícula que incide sobre el escalón con energía total menor que la altura de éste. En cuanto al tiempo, el grupo se mueve hacia el escalón, penetra ligeramente en la región clásicamente excluida y a continuación se ve completamente reflejado por el escalón. Las complicaciones del tratamiento matemático que se presentan al tratar un grupo están indicadas por las complicaciones de su estructura durante la reflexión.

6.4 El potencial escalón (energía mayor que la altura del escalón)

En esta sección se considerará el movimiento de una partícula bajo la influencia de un escalón de potencial (6-11) cuando su energía total E es mayor que la altura V_0 del escalón. Esto es, se tomará $E > V_0$ tal como se ilustra en la figura 6-9.

En la *mecánica clásica* una partícula de energía total E que viaja en la región $x < 0$ en la dirección en la que crece x, sufrirá una fuerza impulsiva retardadora $F = -dV(x)/dx$ en el

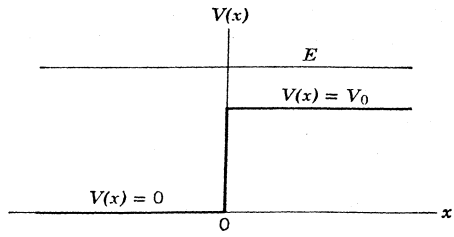


FIGURA 6-9

Relación entre las energías potencial y total para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total mayor que la altura del escalón.

punto $x = 0$. Pero el impulso sólo frenará la partícula y ésta entrará a la región $x > 0$ continuando su movimiento en la dirección en la que crece x. Su energía total E permanece constante; su impulso en la región $x < 0$ es p_1, donde $p_1^2/2m = E$; su impulso en la región $x > 0$ es p_2 donde $p_2^2/2m = E - V_0$.

Se verá que las predicciones de la *mecánica cuántica* no son tan simples. Si E no es mucho mayor que V_0 la teoría predice que la partícula tiene una posibilidad apreciable de verse reflejada por el escalón hacia la región $x < 0$, aun cuando tenga la energía suficiente para pasar sobre el escalón hacia la región $x > 0$.

Un ejemplo de esto se encuentra en el caso de un electrón en el cátodo de una celda fotoeléctrica, donde recibe energía mediante la absorción de un fotón y trata de escapar de la superficie del cátodo metálico. Si su energía no es mucho mayor que la altura del escalón en el potencial que éste siente en la superficie del metal, se verá reflejado hacia atrás y no logrará escapar. Esto conduce a una reducción significante en la eficiencia de las fotoceldas para luz de frecuencia no muy alejadas de la frecuencia de corte.

Un ejemplo más importante de la reflexión que ocurre cuando una partícula intenta pasar sobre un potencial escalón se encuentra en el movimiento de un neutrón en un núcleo. En buena aproximación el potencial que actúa sobre el neutrón en las cercanías de la superficie nuclear es un potencial escalón. El potencial crece muy rápidamente en la superficie nuclear ya que el núcleo trata de enlazar al neutrón. Si en una forma o en otra el neutrón recibe energía y trata de escapar del núcleo, probablemente sea reflejado hacia éste si su energía sólo es un poco mayor que la altura del escalón. Esto tiene el efecto de inhibir la emisión de neutrones con la energía más baja y por lo tanto aumentar de manera considerable la estabilidad de los núcleos en los estados excitados más bajos. El efecto es una manifestación de las propiedades ondulatorias de los neutrones que es muy importante en los procesos que tienen lugar en las reacciones nucleares, tal y como se verá hacia el final de este libro.

En la mecánica cuántica, el movimiento de la partícula bajo la influencia del potencial escalón está descrita por la función de onda

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

donde la eigenfunción $\psi(x)$ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial en cuestión. Esta ecuación tiene diferentes formas en las regiones izquierda y derecha del potencial escalón, a saber

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \qquad x < 0 \quad (6\text{-}31)$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V_0)\psi(x) \qquad x > 0 \quad (6\text{-}32)$$

La eigenfunción $\psi(x)$ también satisface las condiciones de ser finita, monovaluada y continua tanto ella como su primera derivada, particularmente en el punto de unión $x = 0$.

La ecuación (6-31) describe el movimiento de una partícula libre de impulso p_1. Su solución general es

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad x < 0 \quad (6\text{-}33)$$

donde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar}$$

La ecuación (6-32) describe el movimiento de una partícula libre de impulso p_2. Su solución general es

$$\psi(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \qquad x > 0 \quad (6\text{-}34)$$

donde

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar} \qquad E > V_0$$

La función de onda especificada por estas dos formas consisten de ondas estacionarias de longitud de onda de de Broglie $\lambda_1 = h/p_1 = 2\pi/k_1$ en la región $x < 0$ y de la longitud de onda de de Broglie más larga $\lambda_2 = h/p_2 = 2\pi/k_2$ en la región $x > 0$. Obsérvese que las funciones con las que aquí se ha tratado, satisfacen ya los requisitos de ser finitas y monovaluadas pero se deberá considerar explícitamente su continuidad y esto se hará en breve.

Una partícula inicialmente en la región $x < 0$ y moviéndose hacia $x = 0$ debería, en la mecánica clásica, tener una probabilidad igual a uno de pasar por el punto $x = 0$ y penetrar en la región $x > 0$, lo cual no es cierto en la mecánica cuántica. Debido a las propiedades ondulatorias de la partícula existe cierta probabilidad de que la partícula sea reflejada en el punto $x = 0$ donde existe un cambio discontinuo en la longitud de onda de de Broglie. Por lo tanto será necesario tomar ambos términos en la solución general de (6-33) para describir las ondas viajeras incidente y reflejada en la región $x < 0$. Sin embargo, no es necesario tomar el segundo término de la solución general de (6-34) ya que este término describe una onda que viaja en la dirección en la que decrece x en la región $x > 0$. Puesto que la partícula está incidiendo en la dirección en la que crece x, sólo podría provenir de una reflexión en algún punto con una coordenada x positiva mayor (más allá de la discontinuidad en $x = 0$). Como no hay nada fuera de aquí que cause una reflexión, se sabe que solamente existe una onda viajera transmitida en la región $x > 0$ y por lo tanto la constante se hace

$$D = 0 \qquad (6\text{-}35)$$

en forma arbitraria.

Las constantes arbitrarias A, B y C deberán escogerse para que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas en $x = 0$. El primer requisito, que los valores $\psi(x)$ expresados por (6-33) y (6-34) sean los mismos en $x = 0$, se satisfacen si

$$A(e^{ik_1x})_{x=0} + B(e^{-ik_1x})_{x=0} = C(e^{ik_2x})_{x=0}$$

o

$$A + B = C \qquad (6\text{-}36)$$

El segundo requisito, que los valores de las derivadas de las dos expresiones para $\psi(x)$ sean los mismos en $x = 0$, se satisfacen si

$$ik_1A(e^{ik_1x})_{x=0} - ik_1B(e^{-ik_1x})_{x=0} = ik_2C(e^{ik_2x})_{x=0}$$

o

$$k_1(A - B) = k_2C \qquad (6\text{-}37)$$

De las dos últimas ecuaciones numeradas se encuentra

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A \qquad \text{y} \qquad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A \qquad (6\text{-}38)$$

Por lo tanto, la eigenfunción es

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ A\dfrac{2k_1}{k_1 + k_2}e^{ik_2x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (6\text{-}39)$$

Como antes, no será necesario evaluar la constante arbitraria A que determina la amplitud de la eigenfunción.

Es claro que una eigenfunción que satisfaga las dos ecuaciones de continuidad no podía haberse encontrado si desde el inicio se hace igual a cero el coeficiente B de la onda reflejada. Entonces solamente se tendrían dos constantes arbitrarias para satisfacer las dos condiciones de continuidad y no se tendría nada para efectuar la función, demandada por la linealidad de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de una constante arbitraria que determina la amplitud de la eigenfunción.

Por la analogía con la interpretación de la eigenfunción de (6-24) se reconoce que el primer término en la expresión de (6-39) que es válido para $x < 0$ (a la izquierda de la discontinuidad) representa a la onda viajera incidente; el segundo término en la expresión válida para $x < 0$ representa la onda viajera reflejada y la expresión válida para $x > 0$ (a la derecha de la discontinuidad) representa la onda viajera transmitida.

La figura 6-10 ilustra la densidad de probabilidad $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)\psi(x)$ para la función de onda $\Psi(x,t)$ que corresponde a la eigenfunción $\psi(x)$ de (6-39) (en el caso representativo $k_1 = 2k_2$). No se han representado ni la eigenfunción ni la función de onda ya que ambas son complejas. En la región $x > 0$ la función de onda es una onda viajera pura (en este caso de amplitud $4A/3$) que viaja hacia la derecha,y por lo tanto la densidad de probabilidad es constante como se muestra en la parte inferior de la figura (6-1). En la región $x < 0$ la función de onda es una combinación de la onda viajera incidente (de amplitud A) que se mueve hacia la derecha y una onda viajera reflejada (de amplitud $A/3$) que se mueve hacia la izquierda. Como la amplitud de la onda reflejada es necesariamente menor que la de la onda incidente, no es posible que ésta se combine para dar una onda estacionaria pura. Por el contrario, en esta región su suma $\Psi(x,t)$ es algo entre una onda estacionaria y una onda viajera; lo cual se ve en el comportamiento de $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ para $x < 0$ que luce como algo entre la densidad de probabilidad de la onda estacionaria de la figura 6-7 y la densidad de probabilidad de la onda viajera pura de la figura 6-1 que oscila pero tiene valores mínimos mayores que cero.

La relación de la intensidad de la onda reflejada a la intensidad de la onda incidente proporciona la probabilidad de que la partícula sea reflejada por el escalón de potencial hacia la región $x < 0$. Esta probabilidad es el *coeficiente de reflexión* R. Esto es

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^*\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right) = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \qquad E > V_0 \quad (6\text{-}40)$$

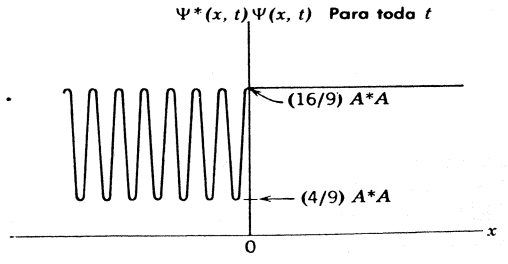


FIGURA 6-10

Densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para la eigenfunción de (6-39), cuando $k_1 = 2k_2$.

De estos resultados se ve que $R < 1$ cuando $E > V_0$, es decir, cuando la energía total de la partícula es mayor que la altura del potencial escalón. Esto está en contraste con el valor $R = 1$ cuando $E < V_0$, que se obtuvo del resultado de la sección (6-3). Por supuesto que lo sorprendente de este resultado no es que $R < 1$, sino que $R > 0$. Ya que una partícula clásica no debería ser reflejada si cuenta con energía suficiente como para pasar la discontinuidad del potencial. Por otra parte, y como se verá en breve, una onda clásica debería ser reflejada en una discontinuidad correspondiente.

Igualmente interesante resulta el *coeficiente de transmisión* T que especifica la probabilidad de que la partícula sea transmitida a través del potencial escalón desde la región $x < 0$ a la región $x > 0$. La evaluación de T es ligeramente más complicada que la evaluación de R ya que la velocidad de la partícula es distinta en cada región. De acuerdo con la norma aceptada, los coeficientes de transmisión y reflexión están definidos realmente en términos de las relaciones de los flujos de probabilidad. Un *flujo de probabilidad* es la probabilidad por segundo de encontrar una partícula cruzando algún punto de referencia en una dirección particular. El flujo de probabilidad incidente es la probabilidad por segundo de encontrar a una partícula cruzando un punto en $x < 0$ en la dirección en la que crece x; el flujo de probabilidad reflejado es la probabilidad por segundo de encontrar a una partícula cruzando un punto en $x < 0$ en la dirección en la que x decrece; y el flujo de probabilidad transmitido es la probabilidad por segundo de encontrar a una partícula cruzando un punto en $x > 0$ en la dirección en la que x crece. Puesto que la probabilidad por segundo de que una partícula cruce un punto dado es proporcional a la distancia que viaja por segundo, el flujo de probabilidad es proporcional, no sólo a la intensidad de la onda apropiada sino también a la velocidad de la partícula. Entonces, de acuerdo con la definición estricta, el coeficiente de reflexión R es

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \frac{B^* B}{A^* A} \tag{6-41}$$

donde v_1 es la velocidad de la partícula en la región $x < 0$. Ya que las velocidades se cancelan, lo que queda es idéntico a la fórmula que previamente se utilizó para R. Para T las velocidades *no* se cancelan y se tiene

$$T = \frac{v_2 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{v_2}{v_1}\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2$$

donde v^2 es la velocidad de la partícula en la región $x > 0$. Ahora

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m} \qquad \text{y} \qquad v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

Así que la expresión anterior resulta

$$T = \frac{k_2}{k_1}\frac{(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad E > V_0 \tag{6-42}$$

Es fácil demostrar mediante la evaluación de R y T de (6-40) y (6-42) que

$$R + T = 1 \tag{6-43}$$

Esta útil relación es la motivación para definir los coeficientes de reflexión y de transmisión en términos de los flujos de probabilidad.

El flujo de probabilidad que incide sobre el potencial escalón se parte en un flujo transmitido y un flujo reflejado pero (6-43) afirma que su suma es igual al flujo incidente; es decir, la

probabilidad de que la partícula no desaparece ni se parte. En cualquier intento particular la partícula seguirá uno u otro camino. Para un gran número de intentos, la probabilidad promedio de seguir en la dirección en la que crece x está medida por T.
promedio de seguir en la dirección en que crece x está medida por T.

Obsérvese que si en (6-40) y (6-42) se intercambian los valores de k_1 y k_2 ni R ni T cambian su valor. Una breve consideración convencerá al estudiante de que esto significa que si la partícula incidiera sobre el potencial escalón en la dirección de decremento de x proveniente de la región $x > 0$ se obtendrían los mismos valores para R y para T. La función de onda que describe al movimiento de la partícula, y consecuentemente el flujo de probabilidad, es parcialmente reflejado, simplemente porque existe un cambio discontinuo en $V(x)$ y no porque $V(x)$ se haga más grande en la dirección en la que incide la partícula. El comportamiento de R y T al intercambiar k_1 y k_2 contiene una propiedad característica de todas las ondas y que en la óptica se le denomina en ocasiones propiedad de *reciprocidad*. Cuando la luz pasa perpendicularmente a través de una interfase entre medios con índices de refracción diferentes, una fracción de la luz es reflejada debido al cambio brusco en su longitud de onda y la misma fracción es reflejada independientemente de si ésta incide por un lado de la interfase o por el otro. Sucede exactamente lo mismo cuando una partícula microscópica experimenta un cambio brusco en su longitud de onda de de Broglie. De hecho las ecuaciones que gobiernan a los dos fenómenos son idénticas en forma. Una vez más se ve que una partícula microscópica se mueve de una manera ondulatoria.

En la figura 6-11 se grafican los coeficientes de reflexión y de transmisión como función de la relación E/V_0. Evaluando k_1 y k_2 en (6-40) y (6-42) se encuentra que estas expresiones para los coeficientes de reflexión y de transmisión se pueden escribir en términos de la relación como

$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}\right)^2 \qquad \frac{E}{V_0} > 1 \quad (6\text{-}44)$$

La figura también representa los resultados

$$R = 1 - T = 1 \qquad \frac{E}{V_0} < 1$$

que se obtienen en (6-27) de la sección anterior para un potencial escalón cuando $E/V^0 < 1$.

Veamos un ejemplo, para $E/V_0 = 1.33$ el coeficiente de transmisión tiene el valor $T = 0.88$. Esta relación E/V_0 corresponde al caso $k_2 = k_1/2$ cuyo patrón de densidad de probabilidad está ilustrado en la figura 6-10 de la que se puede observar que la probabilidad de encontrar a la partícula en una longitud dada del eje x, lo suficientemente larga como para promediar la densidad de probabilidad sobre las fluctuaciones mecánico-cuánticas, es aproximadamente el doble a la derecha del potencial escalón respecto de la izquierda. Desde un punto de vista clásico, que es apropiado para estudiar un promedio sobre las fluctuaciones mecánico-cuánticas, se puede decir que las razones para esto son: (a) la probabilidad de que la partícula pase al escalón y

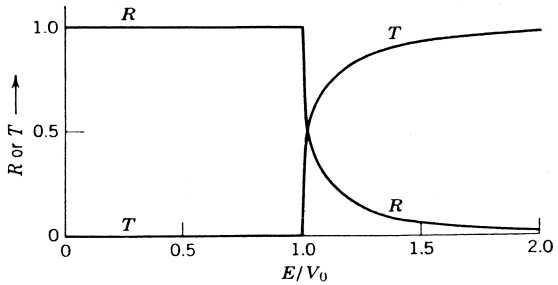


FIGURA 6-11

Coeficientes de reflexión y transmisión R y T para una partícula que incide sobre un potencial escalón. La abscisa E/V_0 es la relación de la energía total de la partícula al incremento en su energía potencial, en el escalón. El caso $k_1 = 2k_2$, que se ilustró en la figura 6-10 corresponde a $E/V_0 = 1.33$.

penetre en la región de la derecha es casi igual a uno y (b) la velocidad de la partícula se parte por mitad cuando esta entra en la región a la derecha del escalón ya que $k = p/\hbar = mv/\hbar$ y $k_2 = k_1/2$, de manera que en esta región se utiliza dos veces más tiempo para cualquier longitud dada del eje.

De la figura 6-11 se ve que la energía de la partícula deberá ser apreciablemente mayor que la altura del potencial escalón para que la probabilidad de reflexión resulte insignificante. Sin embargo, el caso en el que E se hace muy grande no es necesariamente el caso del límite clásico para el cual se sabe que no hay reflexión. El punto es que (6-44) afirma que R sólo depende de la relación E/V_0, de modo que se mantendría el mismo valor si V_0 aumenta al ritmo que lo hace E. Esto parece paradójico hasta que se comprenda que, en el límite de energías grandes, la suposición básica de que el cambio en el valor del potencial escalón $V(x)$ es perfectamente definido, no puede continuar siendo una aproximación a una situación física real.

Si la función potencial sólo cambia en forma muy gradual con x, entonces la longitud de onda de de Broglie cambiará en forma muy gradual. En este caso, la reflexión será despreciable ya que el cambio en la longitud de onda es gradual y la reflexión proviene de un cambio brusco en la longitud de onda. Específicamente, si el cambio fraccional en $V(x)$ es muy pequeño cuando x cambia por una longitud de onda de de Broglie, entonces el coeficiente de reflexión será muy pequeño. Esto da lugar al límite clásico ya que en éste la longitud de onda de de Broglie es tan pequeña que cualquier potencial $V(x)$ físicamente realista sólo cambia por una fracción despreciable en una longitud de onda.

Para partículas en sistemas atómicos o nucleares la longitud de onda de de Broglie puede ser larga comparada con la distancia en la cual el potencial que experimentan las partículas cambia de valor de manera significativa. Entonces, el potencial escalón es una muy buena aproximación. Para estas partículas microscópicas la probabilidad de reflexión puede ser grande.

Ejemplo 6-3 Cuando un neutrón entra a un núcleo experimenta una energía potencial que decae muy rápidamente en la superficie del núcleo desde un valor constante externo $V = 0$ a un valor constante interno de aproximadamente $V = -50$MeV. El decremento en el potencial es lo que hace posible el que un neutrón esté ligado al núcleo. Considérese un neutrón que incide sobre un núcleo con una energía cinética externa $K = 5$ MeV, que es típica para un neutrón emitido mediante una fisión nuclear. Estimar la probabilidad de que el neutrón sea reflejado en la superficie nuclear, o bien de que penetre y tenga oportunidad de inducir otra fisión nuclear.

Para hacer una estimación se deberá tomar el potencial neutrón-núcleo por un potencial unidimensional como el que se ilustra en la figura 6-12. Debido a la propiedad de reciprocidad del coeficiente de reflexión que se puede evaluar mediante (6-44), utilizando $V_0 = 50$ MeV y $E = 55$ MeV por razones que se pueden ver observando la figura. Se tiene

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 50/55}}{1 + \sqrt{1 - 50/55}}\right)^2 \simeq 0.29$$

Esta estimación da una impresión correcta de la gran importancia del fenómeno de la reflexión cuando chocan neutrones de baja energía con los núcleos. Pero el valor numérico que se ha obtenido para el coeficiente de reflexión no es muy preciso ya que el potencial real, neutrón-núcleo, no cae tan rápidamente en la superficie del núcleo (en comparación con la longitud de onda de de Broglie) como un potencial escalón. ◀

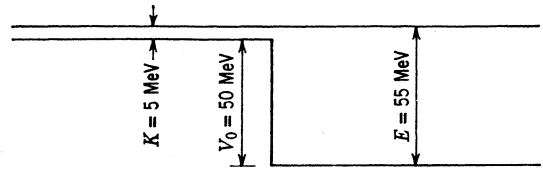
6.5 La barrera de potencial

En esta sección se considerará la *barrera de potencial* mostrada en la figura 6-13. El potencial se puede escribir como sigue

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0 \text{ o } x > a \end{cases} \tag{6-45}$$

FIGURA 6-12

Un neutrón de energía cinética externa K incide sobre un potencial escalón decreciente de profundidad V_0, el cual se aproxima al potencial que siente al entrar al núcleo. Su energía total medida desde el fondo del potencial escalón es E.



Según la *mecánica clásica* una partícula de energía total E en la región $x < 0$ que incide sobre una barrera en la dirección en la que crece x tendrá una probabilidad de ser reflejada igual a uno, si $E < V_0$; y una probabilidad uno de ser transmitida a la región $x > a$ si $E > V_0$.

Ninguna de estas afirmaciones describe de manera adecuada los resultados de la *mecánica cuántica*. Si E es mucho mayor que V_0, la teoría predice que habrá algo de reflexión excepto para ciertos valores de E. Si E es mucho menor que V_0 la mecánica cuántica predice que existe cierta probabilidad de que la partícula sea transmitida a través de la barrera a la región $x > a$.

En "el tunelamiento" a través de una barrera cuya altura excede su energía total, una partícula se comporta como una onda. Pero en la región lejana a la barrera se puede detectar como una partícula localizada sin introducir una incertidumbre significativa en el conocimiento de su energía. Entonces, se *puede* observar la penetración por una partícula de una región clásicamente excluida de ancho limitado. "observar" en el sentido de que es posible observar a la partícula como tal con energía total menor que la energía potencial en la región excluida, tanto antes como después de que penetra en la región. En esta sección se discutirán algunas consecuencias de este efecto fascinante, así como algunas consecuencias de la reflexión de las partículas que intentan pasar sobre la barrera. La siguiente sección está dedicada por completo a ejemplos de tunelamiento a través de barreras y se considerarán tres de importancia particular: (1) la emisión de partículas α por núcleos radiactivos a través de la barrera de potencial que experimentan en la vecindad de éstos, (2) la inversión de la molécula de amonio que proporciona un patrón de frecuencia para los relojes atómicos y (3) el diodo túnel que se utiliza como unidad de conmutación en los circuitos electrónicos rápidos.

De los argumentos cualitativos del último capítulo se sabe que para la barrera de potencial de (6-45) deberán existir soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para *todos* los valores de la energía total $E \geq 0$. También se sabe que la ecuación se parte en tres ecuaciones separadas para las tres regiones: $x < 0$ (a la izquierda de la barrera), $0 < x < a$ (en el interior de la barrera y $x > a$ (a la derecha de la barrera). En las regiones a la izquierda y a la derecha de la barrera las ecuaciones son las de una partícula libre de energía total E. Sus soluciones generales son

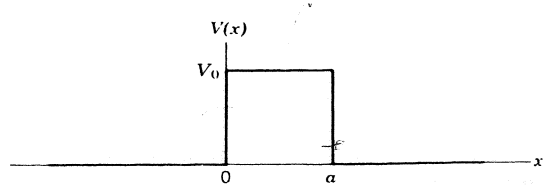
$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} && x < 0 \\ \psi(x) &= Ce^{ik_1 x} + De^{-ik_1 x} && x > a \end{aligned} \qquad (6\text{-}46)$$

donde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

FIGURA 6-13

Barrera de potencial.



En la región interior de la barrera, la forma de la ecuación y su solución general depende de si $E < V_0$ o $E > V_0$. Ambos casos se han tratado en las secciones anteriores. En el primero, $E < V_0$, la solución general es

$$\psi(x) = Fe^{-k_{II}x} + Ge^{k_{II}x} \qquad 0 < x < a \quad (6\text{-}47)$$

donde

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \qquad E < V_0$$

En el segundo caso, $E > V_0$, es

$$\psi(x) = Fe^{ikx_{III}} + Ge^{-ik_{III}x} \qquad 0 < x < a \quad (6\text{-}48)$$

donde

$$k_{III} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \qquad E > V$$

Obsérvese que (7-47) contiene exponenciales *reales* mientras que en (6-46) y (6-48) son exponenciales *complejas*.

Puesto que se está considerando el caso de una partícula que incide desde la izquierda sobre la barrera, en la región de la derecha sólo puede haber una onda transmitida ya que no existe nada en esta región para que se produzca la reflexión. Entonces se puede poner

$$D = 0$$

Sin embargo, en esta situación no se puede poner $G = 0$ en (6-47) ya que el valor de x está limitado en la región de la barrera, $0 < x < a$, así que $\psi(x)$ para $E < V_0$ no se puede hacer infinitamente grande aun estando presente la exponencial creciente. Tampoco se puede poner $G = 0$ en (6-48) ya que $\psi(x)$ para $E > V_0$ tendrá una componente en la región de la barrera reflejada que proviene de la discontinuidad del potencial en $x = a$.

Considérese primero el caso en el cual la energía de la partícula es menor que la altura de la barrera, es decir, el caso:

$E < V_0$

Al acoplar $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en los puntos $x = 0$ y $x = a$, se obtienen cuatro ecuaciones en las constantes arbitrarias $A, B, C, F,$ y G. Estas ecuaciones se pueden utilizar para evaluar $B, C, F,$ y G en términos de A. El valor de A determina la amplitud de la eigenfunción y se puede dejar arbitraria. La forma de la densidad de probabilidad correspondiente a la eigenfunción se indica en la figura 6-14 para una situación típica. En la región $x > a$ la función de onda es una onda viajera pura y por lo tanto la densidad de probabilidad es constante, de la misma manera que para $x > 0$ en la figura 6-10. En la región $x < 0$ la función de onda es fundamentalmente una onda estacionaria pero tiene una componente pequeña de onda viajera debido a que la onda viajera reflejada tiene una amplitud menor que la de la onda incidente. Por lo tanto, la densidad de probabilidad en esta región oscila pero tiene valores mínimos algo mayores que cero, como para $x < 0$ en la figura 6-10. En la región $0 < x < a$ la función de onda tiene componentes de los dos tipos pero principalmente es una onda estacionaria de amplitud exponencialmente decreciente y su comportamiento se puede ver en el comportamiento de la densidad de probabilidad en la región.

El resultado más interesante de los cálculos es la razón T, del flujo de probabilidad transmitido a través de la barrera a la región $x > a$, al flujo de probabilidad incidente sobre la barrera.

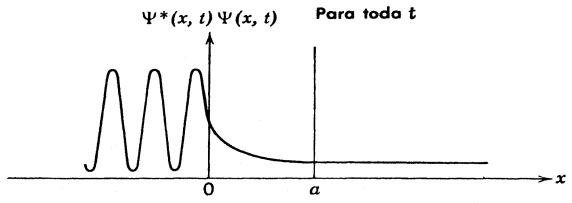


FIGURA 6-14
Función densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para una situación típica de penetración de barrera.

Este coeficiente de transmisión es

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 + \frac{(e^{k_{II}a} - e^{-k_{II}a})^2}{16\dfrac{E}{V_0}\left(1 - \dfrac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} = \left[1 + \frac{\operatorname{senh}^2 k_{II}a}{4\dfrac{E}{V_0}\left(1 - \dfrac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} \tag{6-49}$$

donde

$$k_{II}a = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \qquad E < V_0$$

Si los exponentes son muy grandes esta fórmula se reduce a

$$T \simeq 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2k_{II}a} \qquad k_{II}a \gg 1 \tag{6-50}$$

lo cual es fácilmente verificable. Cuando (6-50) es una buena aproximación, T es extremadamente pequeña.

Estas ecuaciones hacen una predicción que, desde el punto de vista de la mecánica clásica, es muy importante. Dicen que una partícula de masa m y energía total E que incide sobre una barrera de potencial de altura $V_0 > E$ y ancho finito a, tiene cierta probabilidad T de penetrar la barrera y aparecer del otro lado. A este fenómeno se le llama *penetración de barrera* y se dice que la partícula *hizo un túnel* a través de la barrera. Por supuesto que T es extremadamente pequeña en el límite clásico, ya que en tal límite la cantidad $2mV_0a^2/\hbar^2$, que es una medida de la opacidad de la barrera, es extremadamente grande.

En breve se estudiará en detalle la penetración de barrera, pero primero se terminarán de describir los cálculos, considerando el caso en el cual la energía de la partícula es mayor que la altura de la barrera, es decir, el caso:

$$E > V_0$$

En este caso la eigenfunción es oscilatoria en las tres regiones, pero de longitud de onda mayor en la región de la barrera, $0 < x < a$. La evaluación de las constantes B, C, F y G mediante la aplicación de las condiciones de continuidad en $x = 0$ y $x = a$, conducen a la formula siguiente para el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 - \frac{(e^{ik_{III}a} - e^{-ik_{III}a})^2}{16\dfrac{E}{V_0}\left(\dfrac{E}{V_0} - 1\right)}\right]^{-1} = \left[1 + \frac{\operatorname{sen}^2 k_{III}a}{4\dfrac{E}{V}\left(\dfrac{E}{V_0} - 1\right)}\right]^{-1} \tag{6-51}$$

donde

$$k_{III}a = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \qquad E > V_0$$

Ejemplo 6-4. Un electrón incide sobre una barrera de potencial rectangular de altura $V_0 = 10$ eV y ancho $a = 1.8 \times 10^{-10} m$. Esta barrera rectangular es una idealización de la barrera que encuentra un electrón, al ser dispersado por un átomo de gas ionizado negativamente en el "plasma" de un gas de un tubo de descarga. La barrera real no es rectangular pero es aproximadamente de la altura y ancho mencionados. Evaluar el coeficiente de transmisión T y el coeficiente de reflexión R como una función de la energía total E del electrón.

Del ejemplo 6-2 se puede ver que si E es una función razonable de V_0 la longitud de penetración Δx será comparable al ancho de la barrera a. Entonces se puede esperar una transmisión apreciable a través de la barrera. Para determinar exactamente qué tanto se transmite, se utilizan los números dados para evaluar la combinación de parámetros

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \simeq \frac{2 \times 9 \times 10^{-31}\,\text{kg} \times 10\,\text{eV} \times 1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule/eV} \times (1.8)^2 \times 10^{-20}\,\text{m}^2}{10^{-68}\,\text{joule}^2\text{-seg}^2} \simeq 9$$

que intervienen en (6-49). Con lo cual es posible graficar T y también $R = 1 - T$, contra E/V_0, en el intervalo $0 \leq E/V_0 \leq 1$. La gráfica se muestra en la figura 6-15. Se ve que T es muy pequeña cuando $E/V_0 \ll 1$. Pero cuando E/V_0 sólo es algo menor que uno, de modo que E es casi tan grande como V_0, T no es nada despreciable. Por ejemplo, cuando E es la mitad de V_0 así que $E/V_0 = 0.5$, el coeficiente de transmisión tiene el valor $T \simeq 0.05$ que es apreciable y que muestra que los electrones pueden penetrar esta barrera con relativa facilidad.

Para $E/V_0 > 1$ y de la ecuación (6-51) se evalua T y $R = 1 - T$ utilizando la misma combinación de parámetros que se usó con anterioridad. Los resultados también se muestran en la figura 6-15. Para $E/V_0 > 1$ el coeficiente de transmisión T es en general algo menor que uno, permitiendo la

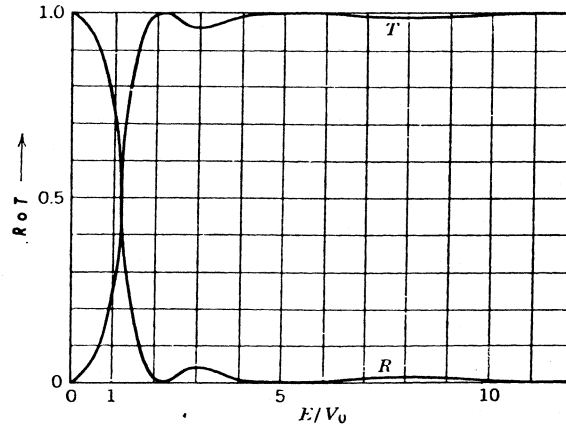


FIGURA 6-15

Coeficientes de transmisión y reflexión T y R para una partícula que incide sobre una barrera de potencial de altura V_0 y espesor a, tal que $2mV_0a^2/\hbar^2 = 9$. La abscisa E/V_0 es la relación de la energía total de la partícula a la altura de la barrera de potencial.

reflexión en las discontinuidades del potencial. Sin embargo, de (6-51) se ve que $T = 1$ siempre que $k_{III}a = \pi, 2\pi, 3\pi \ldots$. lo cual es simplemente la condición de que la longitud de la región de la barrera, a, sea igual a un número entero o semientero de longitudes de onda de de Broglie $\lambda_{III} = 2\pi/k_{III}$. Para esta barrera en particular, los electrones de energía $E \simeq 21$ eV, 53 eV, etc., satisfacen la condición $k_{III}a = \pi, 2\pi$, etc., y, por lo tanto, pasan a la región $x > a$ sin ninguna reflexión. El efecto es un resultado de interferencia constructiva entre las reflexiones en $x = 0$ y $x = a$ y están íntimamente relacionadas con el *efecto Ramsauer* observado en la dispersión de electrones de baja energía por átomos de gases nobles, en los cuales los electrones de ciertas energías, en el rango de unos pocos electronvolts, pasan a través de estos átomos como si estos estuvieran y por lo tanto tienen coeficientes de transmisión igual a uno. Esencialmente en la dispersión de neutrones se ve el mismo efecto, siendo éste entre los núcleos y los neutrones con energías de unos cuantos MeV. El efecto nuclear, denominado *resonancia por tamaño*, se analizará posteriormente en este libro. ◀

Se pueden unir los resultados de las tres últimas secciones para comparar la gráfica de la dependencia del coeficiente de reflexión R con la energía, para el caso de una barrera de potencial, en la figura 6-15, con la gráfica de lo mismo para el caso de un potencial escalón, en la figura 6-11. La comparación muestra que para ambos potenciales $R \to 1$ conforme $E/V_0 \to 0$, y $R \to 0$ conforme $E/V_0 \to \infty$, ocurriendo un decremento de R alrededor de $E/V_0 = 1$. Pero para la barrera de potencial el coeficiente de reflexión se aproxima gradualmente a uno para energías pequeñas, ya que el espesor finito de la región clásicamente excluida permite alguna transmisión. También el coeficiente de reflexión en la barrera de potencial oscila para energías grandes, debido a las interferencias en estas reflexiones provenientes de sus dos discontinuidades. Como el potencial escalón se puede considerar como caso límite de una barrera sumamente ancha, es posible verlo de la comparación que se hizo del comportamiento del coeficiente de reflexión en la barrera de potencial en este límite.

A continuación se discutirán en algún detalle los orígenes de estos resultados. Todos ellos incluyen fenómenos que provienen del comportamiento ondulatorio del movimiento de partículas microscópicas y cada uno de los fenómenos también se observa en otros tipos de movimiento ondulatorio. Como se comentó en el capítulo 5, la ecuación diferencial independiente del tiempo que gobierna el movimiento ondulatorio clásico es de la misma forma que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Por ejemplo, la radiación electromagnética de frecuencia ν que se propaga a través de un medio con índice de refracción μ obedece la ecuación

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2\pi\nu}{c}\mu\right)^2\psi(x) = 0 \tag{6-52}$$

donde la función $\psi(x)$ especifica la magnitud del campo eléctrico o magnético. Cuando se compara ésta con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo escrita en la forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

se ve que éstas son idénticas si el índice de refracción en la primera, está conectado con la función energía potencial en la segunda mediante la relación

$$\mu(x) = \frac{c}{2\pi\nu}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]} \tag{6-53}$$

Entonces el comportamiento de un sistema óptico con índice de refracción $\mu(x)$ debería de ser idéntico al comportamiento de un sistema mecánico con energía potencial $V(x)$, siempre que las dos funciones estén relacionadas mediante (6-53). En efecto, existen fenómenos ópticos que

son análogos exactamente a alguno de la mecánica cuántica que aparece al considerar el movimiento de una partícula no ligada. Un fenómeno óptico completamente análogo a la transmisión total de partículas sobre barreras de longitud igual a un número entero o semientero de longitudes de onda, se utiliza en el recubrimiento de lentes con objeto de obtener transmisiones muy luminosas y en películas delgadas como filtros ópticos.

Un análogo óptico de la penetración de barreras por partículas son los índices de refracción imaginarios que aparecen en la reflexión total interna. Considérese un rayo de luz que incide sobre una interfase vidrio-aire a un ángulo mayor que el ángulo crítico θ_c. Al comportamiento resultante del rayo de luz se le llama *reflexión total interna* y se ilustra en la parte inferior de la figura 6-16. Un tratamiento detallado del proceso en términos de la teoría electromagnética muestra que el índice de refracción, medido a lo largo de la línea ABC, es real en la región AB pero imaginario en la región BC. Obsérvese que (6-53) sugiere una $\mu(x)$ imaginaria para una región análoga a una en la cual $E < V(x)$. Además, la teoría electromagnética muestra que existen vibraciones electromagnéticas en la región BC con exactamente la misma forma que la onda estacionaria con exponencial decreciente de (6-29) para la región en la que $E < V(x)$. El flujo de energía (el vector de Poynting) es igual a cero en esta onda estacionaria electromagnética, de la misma manera como el flujo de probabilidad es cero en la onda estacionaria mecánico-cuántica, de modo que el rayo de luz es totalmente reflejado. Sin embargo, si se coloca un segundo bloque de vidrio suficientemente cerca del primer bloque como para que esté en la región en la cual las vibraciones electromagnéticas permanezcan apreciables, estas vibraciones serán recogidas y se propagarán a través del segundo bloque. Además las vibraciones electromagnéticas en la brecha de aire llevan ahora un flujo de energía hasta el segundo bloque. Este fenómeno, llamado *reflexión total interna frustrada, se* ilustra en la parte inferior de la figura 6-16. En la mecánica cuántica sucede esencialmente lo mismo cuando la región en la cual $E < V(x)$ se reduce de un ancho infinito (potencial escalón) a un ancho finito (barrera de potencial). La transmisión de la luz a través de una brecha de aire a un ángulo de incidencia mayor que el ángulo crítico fue observado por primera vez por Newton hacia 1700. La ecuación que relaciona la intensidad del haz transmitido con el espesor de la

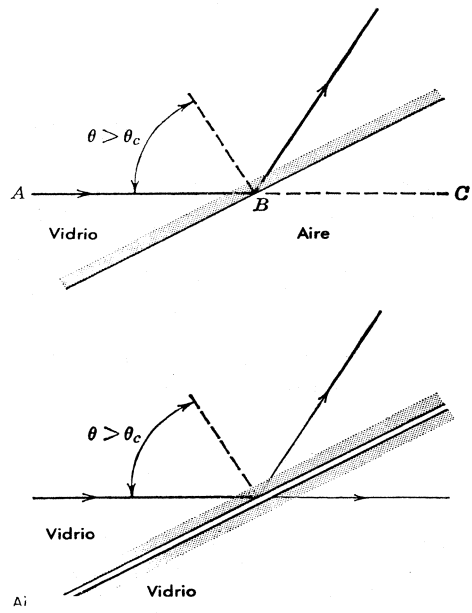


FIGURA 6-16

Arriba: Ilustración de reflexión total interna de un rayo de luz. El ángulo de incidencia es mayor que el ángulo crítico. *Abajo:* Ilustración de la reflexión total interna frustrada. Algo del rayo de luz se transmite a través de la brecha de aire si la brecha es lo suficientemente fina.

brecha de aire y otros parámetros, es idéntica en forma a la ecuación (6-49) y ha sido verificada experimentalmente.

Es particularmente fácil observar la reflexión total interna frustrada en las ondas electromagnéticas, utilizando la región de microondas del espectro y dos bloques de parafina separados por una brecha de aire. Es más, una inspección cuidadosa de las fotografías del "tanque de ondas" de las figuras 6-17 y 6-18 mostrará que el fenómeno se puede observar con ondas de agua. La reflexión total interna frustrada o su equivalente mecánico -cuántico que es la penetración de la barrera, proviene de las propiedades comunes a todas las formas de movimiento ondulatorio ya sean clásicas o mecánico-cuánticas.

6.6 Ejemplos de penetración de barrera por partículas

Existen un número de ejemplos importantes e interesantes de la penetración de barreras por partículas microscópicas. Un ejemplo muy difundido pero poco conocido se encuentra en el alambrado de una casa.

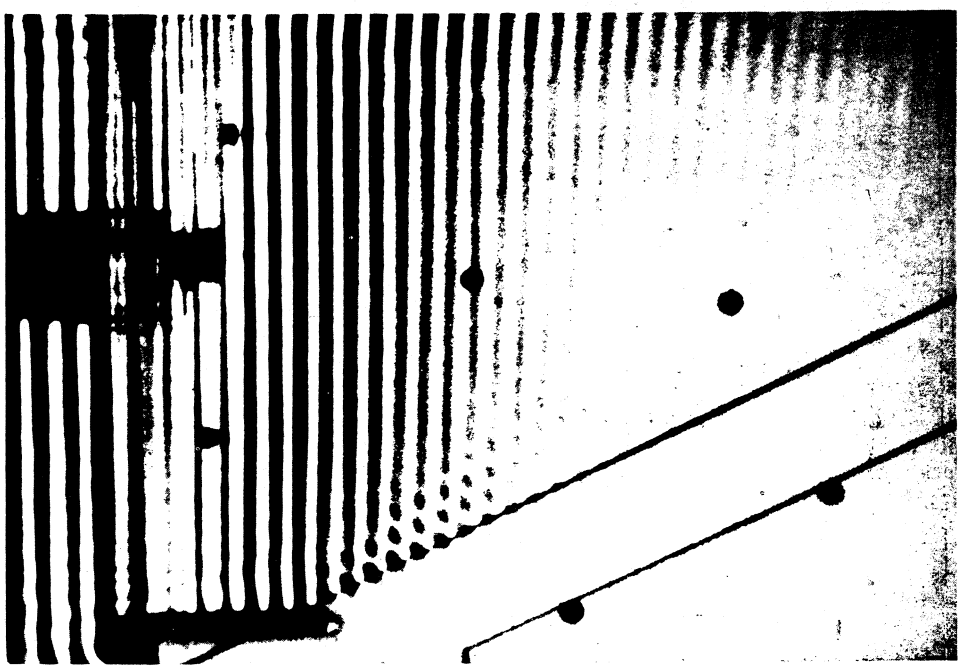


FIGURA 6-17

Reflexión total interna de ondas de agua. Un vibrador largo situado a la izquierda produce un conjunto de ondas en una región de poca profundidad, se han iluminado las ondas para hacer sus crestas fácilmente visibles. Las ondas son reflejadas totalmente en la frontera diagonal de una región donde la capa de agua se hace bruscamente profunda, esta reflexión ocurre debido a que la velocidad de las ondas de agua dependen de la profundidad de ésta. Observe que la intensidad de las ondas decrece rápidamente cuando tratan de penetrar en una región de mayor profundidad, pero existe algo de penetración en esta región. (Cortesía de Film Studio, Education Development Center).

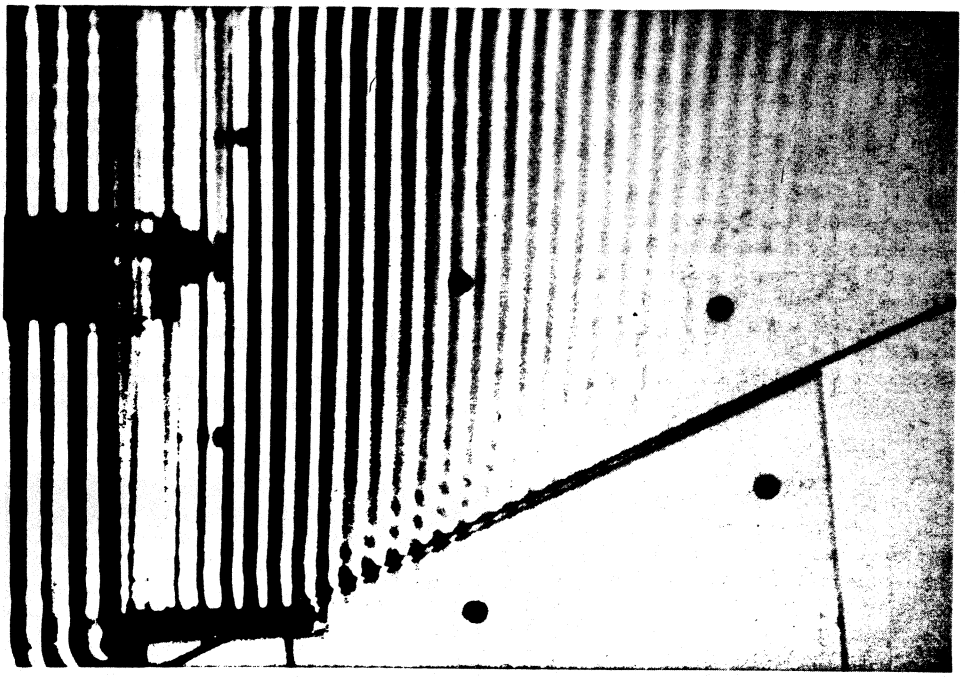


FIGURA 6-18

Reflexión total interna frustrada de ondas de agua. Cuando la región de más profundidad produce una brecha lo suficientemente fina, las ondas que han penetrado en la región más profunda se levantan y transmiten a una segunda región de poca profundidad. (Cortesía de Film Studio, Education Development Center).

La forma usual en la que un electricista junta dos alambres es torciéndolos juntos. Invariablemente existe una capa de óxido de cobre entre los dos alambres y este material es un aislante efectivo. Afortunadamente, la capa es tan delgada que los electrones que fluyen por el alambre son capaces de hacer un túnel a través de la capa mediante penetración de barrera.

A través de la Historia, la primera aplicación de la teoría de la mecánica cuántica de la penetración de barrera por partículas fue explicar una vieja paradoja concerniente con la emisión de partículas α en el decaimiento de núcleos radiactivos. Como un ejemplo típico considérese el núcleo de U^{238}. La energía potencial $V(r)$ de una partícula α a una distancia r desde el centro del núcleo había sido investigada mediante experimentos de dispersión realizados por 1910 por Rutherford y otros. Utilizando como prueba las partículas α de 8.8 MeV emitidas por el núcleo radiactivo de Po^{212}, se observó que la probabilidad de dispersión a distintos ángulos por el núcleo de U^{238} estaba de acuerdo con las predicciones de la fórmula de dispersión de Rutherford (vista en el capítulo 4). El lector recordará que la fórmula está basada en la suposición de que la interacción entre la partícula α y el núcleo sigue estrictamente la ley de Coulomb repulsiva que debería esperarse operara entre dos objetos esféricos cargados positivamente. Entonces Rutherford fue capaz de concluir que, para el núcleo de U^{238}, la función potencial $V(r)$ que experimentaba una partícula α vecina seguía la ley de Coulomb $V(r) = 2Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$, donde $2e$ es la carga de la partícula α y Ze es la carga nuclear. Al menos ésta es la energía para distancias mayores que $r'' = 3 \times 10^{-14}$ m donde $V(r'') = 8.8$ MeV, para la partícula α de prueba. También se sabía por la dispersión de partículas α por núcleos de átomos ligeros que $V(r)$ eventualmente se aparta de la ley $1/r$ cuando $r < r'$, el radio del núcleo, a pesar de que en aquel tiempo no se conocía el valor exacto de r' para los núcleos de átomos pesados. Además puesto que ocasionalmente las partículas α son emitidas por el

núcleo de U^{238} se supuso que éstas existían en el interior de este núcleo al cual normalmente están ligadas por el potencial $V(r)$. De estos argumentos se concluyó que la forma de $V(r)$ en la región $r < r''$ debería ser cualitativamente como se indica en la figura 6-19. Estas conclusiones han podido verificarse mediante experimentos modernos que utlizan la dispersión de partículas α producidas en ciclotrones con una energía lo suficientemente grande como para permitir la investigación del potencial sobre todo el intervalo de r completo.

La paradoja estaba conectada con el hecho de que también se conocía que la energía cinética de las partículas α emitidas en el decaimiento radiactivo del U^{238} era 4.2 MeV. Por supuesto que la energía cinética era medida a una distancia muy grande desde el núcleo donde $V(r) = 0$ y la energía cinética total es igual a la energía total E. Este valor de la constante de la energía total de la partícula α emitida en el decaimiento del U^{238} se muestra también en la figura 6-19. Desde el punto de vista de la mecánica clásica la situación fue ciertamente paradójica. Una partícula α de energía total E está inicialmente en la región $r < r'$, esta región está separada del resto del espacio por una barrera de potencial cuya altura se sabía que al menos era el doble de E y se observó que, ocasionalmente, la partícula α penetraba la barrera y se movía hacia valores grandes de r.

Puesto de otra manera, de acuerdo con la mecánica clásica una partícula α emitida desde una región en la que la función energía potencial tiene la forma mostrada en la figura 6-19, debería necesariamente tener una energía cinética mucho mayor de la que en realidad se le observa cuando se encuentra lejos de la región. La razón es simplemente que en la mecánica clásica la energía total debería ser mayor que el valor máximo de la energía potencial, para que la partícula escape de la barrera. Considérese la analogía siguiente. Usted pasea por debajo de un puente alto sin ver hacia arriba, repentinamente le pega en la cabeza un ladrillo con un golpe suave.

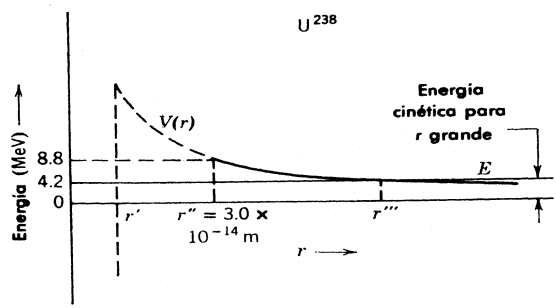
No existe lugar de donde provenga el ladrillo excepto del puente, pero un ladrillo cayendo de tal altura debería desarrollar energía cinética suficiente como para matarlo.

En 1928 Gamow, Condon y Gurney trataron la emisión de partículas α como un problema mecánico cuántico de penetración de barrera. Supusieron que $V(r) = 2Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ para $r > r'$ donde $2e$ es la carga de la partícula α y Ze es la carga del núcleo remanente después de haber sido emitida la partícula α, también supusieron que $V(r) < E$ para $r < r'$ tal como se muestra en la figura 6-19. Para evaluar el coeficiente de transmisión T se utilizó la ecuación (6-50) ya que el exponente $k_{II}a$, que determina a T, tiene un valor grande comparado con uno. De hecho, el exponente es tan grande que la exponencial domina completamente el comportamiento de T y es suficiente tomar

$$T \sim e^{-2k_{II}a} = e^{-2\sqrt{(2m/\hbar^2)(V_0 - E)}\,a} \tag{6-54}$$

FIGURA 6-19

La energía potencial V que actúa sobre una partícula α a una distancia r del centro de un núcleo de U^{238} y la energía total E de una partícula α emitida por un núcleo radiactivo. La parte sólida de la curva de potencial se conoció a partir de medidas de dispersión que siguen una ley de Coulomb hasta la distancia de máximo acercamiento r'' de una partícula α de 8.8 MeV. La parte punteada de la curva muestra que el potencial se supuso continuo para seguir una ley de Coulomb hasta el radio nuclear r' donde debería caer muy rápidamente para formar una región de enlace. Una partícula α de 4.2 MeV emitida por un núcleo radiactivo debería penetrar la barrera de potencial desde el radio nuclear r' al punto a distancia r''' desde el centro donde la energía potencial V resulta menor que su energía total E.



Esta expresión fue derivada para una barrera rectangular de altura V_0 y ancho a, pero cuando la expresión es válida se puede aplicar a la barrera $V(r)$ considerándola como un conjunto de barreras rectangulares adyacentes de altura $V(r_i)$ y ancho sumamente pequeño Δr_i. En el límite, este razonamiento conduce a la expresión

$$T \simeq e^{-2\int_{r'}^{r'''} \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r)-E]}\, dr} \tag{6-55}$$

donde la integración se toma desde el radio nuclear r' donde $V(r)$ es superior a E, al radio r''' donde $V(r)$ está por debajo de E. Esta justificado utilizar (6-54), que fue derivada para el caso unidimensional, en (6-55) que es una expresión para un problema tridimensional, debido a que las partículas α casi siempre se emiten con impulso angular cero. Esto es, esencialmente se mueve a lo largo de trayectorias rectilíneas que emergen del centro del núcleo y, por lo tanto, obedecen ecuaciones que esencialmente son unidimensionales.

La cantidad T da la probabilidad de que una partícula α penetre la barrera en un intento. Se puede estimar que el número de intentos por segundo sería

$$N \simeq \frac{v}{2r'} \tag{6-56}$$

si se supusiera que una partícula α es rebotada con una velocidad v en el interior del núcleo de diámetro $2r'$. Entonces la probabilidad por segundo de que un núcleo decaiga por la emisión de una partícula α, llamada la razón de decaimiento R, sería

$$R \simeq \frac{v}{2r'} e^{-2\int_{r'}^{r'''} \sqrt{(2m/\hbar^2)(2Ze^2/4\pi\epsilon_0 r - E)}\, dr} \tag{6-57}$$

Actualmente se sabe que (6-56) no es una estimación precisa, pero esta función o su forma más correcta, varía tan lentamente en comparación con la rápida variación en la exponencial que el resultado expresado por (6-57) es una estimación precisa.

Al aplicar (6-57) a un núcleo radiactivo particular, Gamow, Condon y Gurney tomaron como conocidas todas las cantidades en la expresión, a excepción de v y r' (r''' se puede evaluar a partir de Z y E) Suponiendo a v comparable con la velocidad de la partícula α después de la emisión es decir $mv^2/2 = E$), la razón de decaimiento R es entonces solamente una función del radio nuclear r'. Utilizando $r' = 9 \times 10^{-15}$ m, que ciertamente estaba dentro de los valores obtenidos por Rutherford los análisis de la dispersión de partículas α por núcleos ligeros, obtuvieron valores de R que estaban en concordancia con aquellos medidos experimentalmente, a pesar de que la razón de decaimiento varía sobre un intervalo *tremendamente* grande. Como un ejemplo, la razón de decaimiento para U^{238}, es $R = 5 \times 10^{-18}\text{seg}^{-1}$. Un ejemplo en el otro extremo es Po^{212} para el cual $R = 2 \times 10^6$ seg^{-1}. Esta variación en R se debe principalmente a la variación de un núcleo radiactivo al siguiente, de la energía E de las partículas α emitidas. La altura de la barrera y el radio nuclear no cambian de manera significativa para los núcleos en el intervalo limitado de la tabla periódica en el cual se encuentran los núcleos emisores de α. En la figura 6-20 se muestra una comparación entre el experimento y la teoría. La exitosa aplicación de la mecánica cuántica de Schrödinger a la emisión paradójica de partículas constituye una de sus primeras y más convincentes verificaciones.

La penetración de barrera de átomos tiene lugar en la *inversión* periódica de la molécula de amonio, NH_3. La figura 6-21 muestra esquemáticamente la estructura de esta molécula que consiste de tres átomos de H arreglados en un plano y equidistantes del átomo de N; existen dos posiciones de equilibrio completamente equivalentes para el átomo de N, una a cada lado del plano que contiene a los átomos de H. La figura 6-22 indica la energía potencial que actúa sobre el átomo de N como una función de su distancia x desde el plano. La función potencial $V(x)$ tiene dos mínimos, que corresponden a las dos posiciones de equilibrio y que están dispuestos simétricamente alrededor de un máximo relativo localizado en $x = 0$. Este máximo, que constituye una barrera que separa las dos regiones de enlace, proviene de las fuerzas de Coulomb repulsivas que actúan sobre el átomo de N cuando éste penetra al plano de los átomos de H. Las fuerzas son lo suficientemente intensas como para que en la mecánica clásica el átomo de N no sea capaz de cruzar la barrera si la molécula se encuentra en uno de sus estados de baja energía; es decir, las energías más bajas permitidas de este potencial de enlace están por debajo de la cima de la

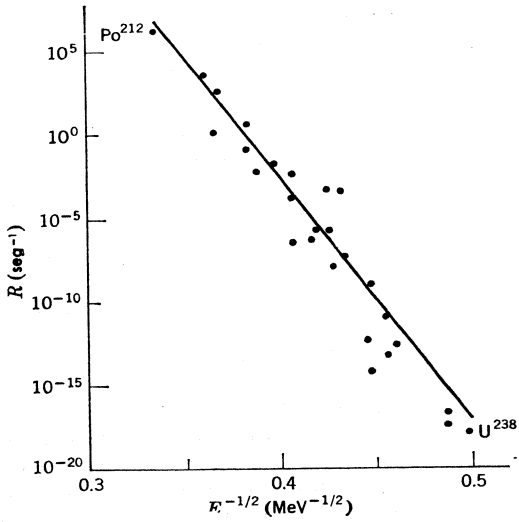


FIGURA 6-20

Probabilidad por segundo R de que un núcleo radiactivo emita una partícula α de energía E. Los puntos son mediciones experimentales y la curva sólida es la predicción de (6-57) como resultado de la teoría de la penetración de barrera.

barrera, tal y como se indica en la figura. Pero la penetración de la región clásicamente excluida permite que el átomo de N pase a través de la barrera. Si inicialmente se encontraba en un lado, hará un túnel y eventualmente aparecerá en el otro y después lo repetirá en la dirección opuesta. En realidad el átomo de N oscila yendo y viniendo a través del plano de los átomos de H. La frecuencia de oscilación es $\nu = 2.3786 \times 10^{10}$ Hz, cuando la molécula está en su estado base. Esta frecuencia es mucho menor que la encontrada en vibraciones moleculares que no presentan penetración de barrera o en otros fenómenos atómicos moleculares. Debido a las simplificaciones técnicas que resultaron, la frecuencia se utilizó como un patrón en los primeros relojes atómicos que miden el tiempo con precisión máxima.

Un ejemplo reciente y muy útil de la penetración de barrera por electrones se presenta en el *diodo túnel*, que un dispositivo semiconductor, como un transistor, y que se utiliza en los circuitos electrónicos rápidos ya que su respuesta a alta frecuencia es mucho mejor que la de cualquier transistor. La operación de un diodo túnel se explicará en el capítulo 13 dentro del contexto de un análisis sobre semiconductores. De modo que aquí sólo se dirá que el dispositivo utiliza penetración de barrera controlable para interrumpir corrientes tan rápidamente, que se puede utilizar para hacer un oscilador que pueda operar a frecuencias superiores a 10^{11} Hz.

6.7 Potencial de pozo cuadrado

En las secciones anteriores se ha tratado el movimiento de partículas en potenciales que son incapaces de ligar la partícula a regiones limitadas del espacio. También se han presentado un

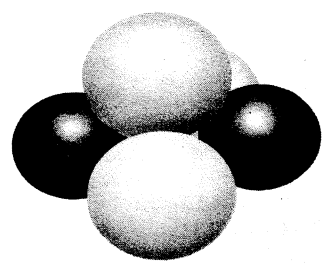


FIGURA 6-21

Ilustración esquemática de la molécula de NH_3. Las esferas claras representan los tres átomos de H arreglados en un plano. Las esferas obscuras representan dos posiciones de equilibrio equivalentes del átomo de N solo.

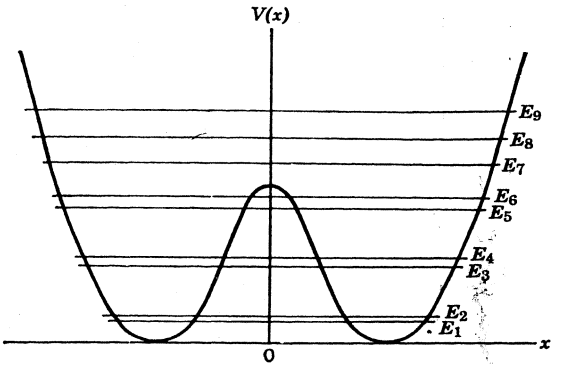


FIGURA 6-22

La energía potencial del átomo de N en la molécula de NH_3 como una función de su distancia al plano que contiene los tres átomos de H y que está en $x=0$. En su estado de energía más bajo, la energía total de la molécula está por debajo de la cima de la barrera que separa los dos mínimos, como se indica por los eigenvalores del potencial mostrados en la figura.

número de fenómenos cuánticos interesantes en los que no ocurre la cuantización de la energía. Por supuesto que del análisis cualitativo del último capítulo se desprende que sólo se puede esperar la cuantización de la energía para potenciales que son capaces de ligar a una partícula. En esta sección se estudiará uno de los potenciales más simples que tienen esta propiedad, el *potencial de pozo cuadrado.*

El potencial se puede escribir

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6\text{-}58)$$

La ilustración de la figura 6-23 indica el origen de su nombre. Si la partícula tiene una energía total $E < V_0$, entonces según la *mecánica clásica* sólo puede estar en la región $-a/2 < x <$

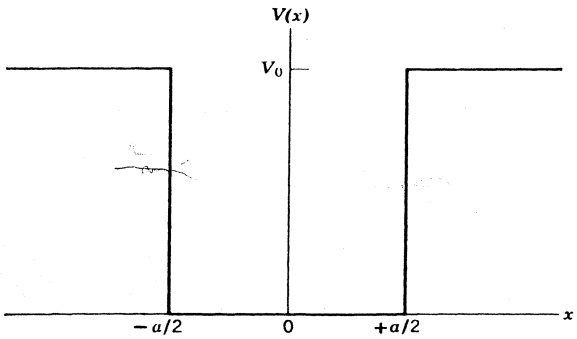


FIGURA 6-23

Un pozo de potencial.

$+ a/2$ (dentro del pozo). La partícula está ligada a esta región y va y viene entre los extremos de ella con impulso de magnitud constante pero dirección alterna. Además, *cualquier* valor $E \geq 0$ de la energía total es posible. Pero en la *mecánica cuántica* solamente son posibles *ciertos* valores de la energía total separados discretamente.

Con frecuencia se utiliza en la mecánica cuántica el potencial de pozo cuadrado para representar una situación en la cual una partícula se mueve en una región restringida del espacio bajo la influencia de las fuerzas que lo mantienen en la región. A pesar de que este potencial simplificado pierde alguno de los detalles del movimiento, mantiene el rasgo esencial de ligar la partícula por fuerzas de cierta intensidad a una región de cierto tamaño. Del estudio del ejemplo 6-2 resulta que el representar al potencial que actúa sobre un electrón de conducción en un bloque de metal por un pozo cuadrado es una buena aproximación. La profundidad del pozo es aproximadamente 10 eV y su ancho es igual al ancho del bloque. La figura 6-24 indica, desde un punto de vista diferente al utilizado en el ejemplo 6-2, la manera de obtener algo como un pozo cuadrado mediante la superposición de los potenciales producidos por los iones positivos que se encuentran sumamente próximos en el metal. En el ejemplo 6-3 se indica que el movimiento de un neutrón en un núcleo se puede aproximar suponiendo que la partícula se encuentra en un pozo de potencial cuadrado con una profundidad de aproximadamente 50 MeV. Las dimensiones lineales del potencial son iguales al diámetro nuclear que es aproximadamente de 10^{-14} m.

El tratamiento principia por considerar cualitativamente la forma de las eigenfunciones que son soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el pozo de potencial cuadrado de (6-58). Como en las secciones anteriores el problema se descompone en tres regiones: $x < -a/2$ (a la izquierda del pozo), $-a/2 < x < +a/2$ (interior del pozo) y $x > +a/2$(a la derecha del pozo). La llamada *solución general* a la ecuación general para la región interior del pozo es

$$\psi(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \qquad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad -a/2 < x < +a/2 \qquad (6\text{-}59)$$

El primer término describe ondas que viajan en la dirección en la que x crece y el segundo describe ondas viajeras en la dirección en la que x decrece. (Esta solución fue derivada en la sección 6-2. Si el lector no ha visto esa sección, puede demostrar con facilidad que (6-59) es una solución a la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para cualesquiera valores de las constantes arbitrarias A y B, substituyéndola en (6-2).

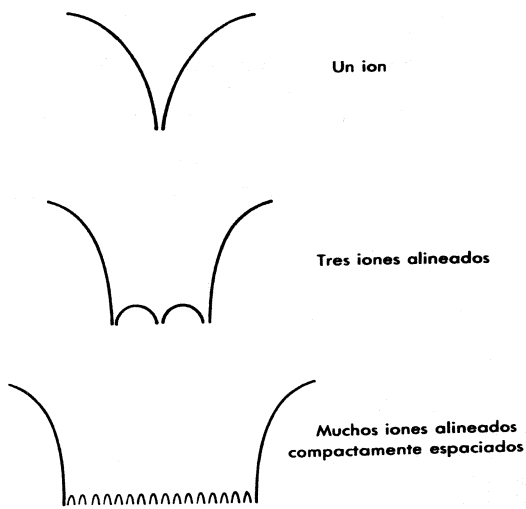


FIGURA 6-24

Indicación cuantitativa de como una aproximación a un pozo de potencial cuadrado resulta de la superposición de potenciales que actúan sobre un electrón de conducción en un metal. Los potenciales se deben a los iones positivos estrechamente espaciados en el metal.

Ahora, la descripción clásica de la partícula rebotando hacia adelante y hacia atrás dentro del pozo, sugiere que la eigenfunción en esta región debería corresponder a una mezcla igual de ondas que viajan en ambas direcciones. Las ondas viajeras dirigidas en oposición y de igual amplitud se combinarán para formar una onda estacionaria, lo cual se puede obtener haciendo iguales las constantes arbitrarias, es decir $A = B$; lo cual produce

$$\psi(x) = B(e^{ik_I x} + e^{-ik_I x})$$

que se puede escribir

$$\psi(x) = B' \frac{e^{ik_I x} + e^{-ik_I x}}{2}$$

donde B' es una nueva constante arbitraria definida por la relación $B' = 2B$. Pero esta combinación de exponenciales complejas simplemente da

$$\psi(x) = B' \cos k_I x \qquad \text{donde } k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6\text{-}60)$$

Esta eigenfunción describe una onda estacionaria ya que una inspección de la función de onda asociada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ demuestra que tiene nodos en las posiciones fijas en las que cos $k_I x = 0$.

También es posible obtener una onda estacionaria haciendo $-A = B$, lo cual produce

$$\psi(x) = A(e^{ik_I x} - e^{-ik_I x})$$

que se puede escribir

$$\psi(x) = A' \frac{e^{ik_I x} - e^{-ik_I x}}{2i}$$

donde A' es una nueva constante arbitraria definida por $A' = 2iA$. Pero esto es justamente

$$\psi(x) = A' \operatorname{sen} k_I x \qquad \text{donde } k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6\text{-}61)$$

Puesto que tanto (6-60) como (6-61) son soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el mismo valor de E y puesto que la ecuación diferencial es lineal en $\psi(x)$, su suma también es solución; como se puede verificar por substitución directa.

$$\psi(x) = A' \operatorname{sen} k_I x + B' \cos k_I x \qquad \text{donde } k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad -a/2 < x < +a/2 \quad (6\text{-}62)$$

En efecto, esta es una *solución* general a la ecuación diferencial para la región *interna* al pozo, y puesto que contiene dos constantes arbitrarias, es una solución tan general como lo es la (6-59). Matemáticamente las dos son completamente equivalentes. Sin embargo, es más conveniente utilizar (6-62) en los problemas que involucran el movimiento de partículas ligadas. Físicamente, se puede pensar en (6-62) como la descripción de una situación en la cual una partícula se mueve de tal manera que se conoce con precisión que la magnitud de su impulso es $p = \hbar k_I = \sqrt{2mE}$, pero cuya dirección puede ser la dirección de crecimiento o de disminución de x.

Considérense ahora las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en las dos regiones *externas* al pozo potencial: $x < -a/2$ y $x > +a/2$. En estas regiones las *soluciones generales* tienen las formas

$$\psi(x) = Ce^{k_{II}x} + De^{-k_{II}x} \quad \text{donde } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x < -a/2 \quad (6\text{-}63)$$

y

$$\psi(x) = Fe^{k_{II}x} + Ge^{-k_{II}x} \quad \text{donde } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x > +a/2 \quad (6\text{-}64)$$

Las dos formas de $\psi(x)$ describen las ondas estacionarias en la región externa al pozo, ya que en la función de onda asociada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ las dependencias con x y con t ocurren como factores separados. Estas ondas estacionarias no tienen nodos, pero se juntan con las ondas estacionarias del interior del pozo que sí tienen nodos. (En la sección 6-3 se derivaron las soluciones generales. Su validez para cualesquiera valores de las constantes arbitrarias C, D, F, y G puede verificarse fácilmente por substitución en (6-13)).

En cada una de las tres regiones de x se pueden construir las eigenfunciones válidas para toda x uniendo las formas supuestas para las soluciones generales a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Estas tres formas contienen seis constantes arbitrarias: A', B', C, D, F, y G. Ahora, puesto que una eigenfunción aceptable debería permanecer finita en cualquier parte, es posible ver que deberán hacerse $D = 0$ y $F = 0$. Si esto no se hiciera la segunda exponencial en (6-63) haría $\psi(x) \to \infty$ cuando $x \to -\infty$, y la primera exponencial en (6-64) debería ser $\psi(x) \to \infty$ conforme $x \to +\infty$. Es posible obtener cuatro ecuaciones más que contengan a las constantes arbitrarias restantes demandando que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas en las dos fronteras entre las regiones $x = -a/2$ y $x = +a/2$, como se requiere para eigenfunciones aceptables (las cuales ya son monovaluadas). Pero no se puede permitir que las cuatro constantes arbitrarias restantes sean especificadas por estas cuatro ecuaciones. Una de ellas deberá permanecer sin especificar, de modo que la amplitud de la eigenfunción pueda ser arbitraria, lo cual se requiere ya que la ecuación diferencial es lineal en la eigenfunción $\psi(x)$. Entonces parece haber una discrepancia entre al número de ecuaciones por satisfacer y el número de constantes que se pueden ajustar, pero esto se resuelve tomando a la energía total como una constante adicional susceptible de ajustar. Posteriormente se verá que este procedimiento funciona sólo para ciertos valores de E. Esto es, surgirá cierto conjunto de valores posibles de la energía total E y así la energía estará *cuantizada* a un conjunto de eigenvalores.La ecuación de Schrödinger tiene soluciones aceptables solamente para estos valores de la energía total.

Como se verá en breve al tratar un caso especial, no es difícil llevar a cabo este procedimiento. Pero el caso general conduce a una solución que contiene una ecuación trascendental complicada (una ecuación en la cual la incógnita está contenida en el argumento de una función tal como una senoide), lo cual impide expresar la solución en una forma matemática concisa. Por lo tanto, se dejarán los detalles de la solución general para el apéndice G y aquí se continuará por el momento con el análisis cualitativo.

Las figuras 6-25 y 6-26 muestran, respectivamente, los eigenvalores y las eigenfunciones para los tres estados ligados de una partícula en un pozo de potencial cuadrado particular. No se

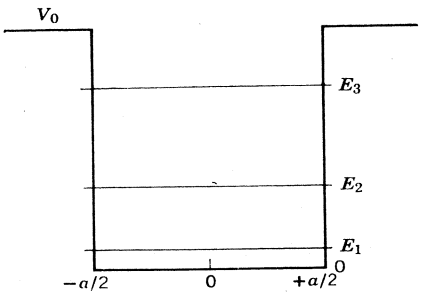


FIGURA 6-25

Pozo cuadrado de potencial y sus tres eigenvalores. No se muestra el continuo de eigenvalores de energía $E > V_0$.

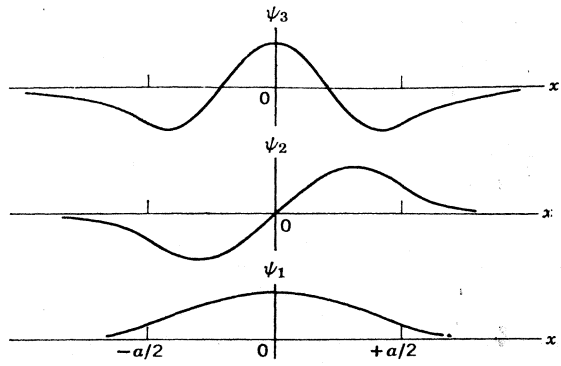


FIGURA 6-26

Las tres eigenfunciones ligadas para el pozo de potencial de la figura 6-25.

muestra un continuo de eigenvalores que se extiende desde la cima del pozo hacia arriba ya que está permitido cualquier valor de la energía total E que sea mayor que la altura de las paredes del potencial V_0, tampoco se muestra el continuo de eigenfunciones. Enfocando primero la atención sobre la región de x dentro del pozo se observa que la curvatura de la parte senoidal de la eigenfunción aumenta conforme aumenta la energía de los eigenvalores correspondientes. En consecuencia a mayor energía de los eigenvalores es mayor el número de oscilaciones de las eigenfunciones correspondientes y mayor su número de onda. Estos resultados reflejan el hecho de que el número de onda k_I, en la solución de (6-62) para la región interior al pozo, es proporcional a $E^{1/2}$. El pozo cuadrado de potencial descrito en la figura no tiene un cuarto eigenvalor ligado debido a que el valor asociado de k_I y por lo tanto el de $E^{1/2}$, debería ser muy grande como para satisfacer la condición de ligadura $E < V_0$.

Considérense ahora las partes de las eigenfunciones que se extienden a las regiones exteriores al pozo. En la mecánica clásica nunca sería posible encontrar a una partícula en estas regiones ya que su energía cinética es $p^2/2m = E - V(x)$, que es negativa donde $E < V(x)$.

Obsérvese que las eigenfunciones en estas *regiones clásicamente excluidas* se van a cero más rápidamente conforme menor es la energía de los eigenvalores correspondientes. Esto está de acuerdo con el hecho de que el parámetro exponencial k_{II}, en las soluciones de (6-63) y (6-64) para la región exterior al pozo, es proporcional a $(V_0 - E)^{1/2}$. También está de acuerdo con la idea que constituye la violación más seria de las restricciones clásicas de que la energía total E deberá ser, al menos, tan grande como la energía potencial $V(x)$, las eigenfunciones son más renuentes a penetrar a las regiones clásicamente excluidas.

Resulta instructivo el considerar el efecto que tiene sobre las eigenfunciones el permitir que las paredes del pozo cuadrado se hagan muy altas, es decir, hacer $V_0 \to \infty$. En la figura 6-27 se

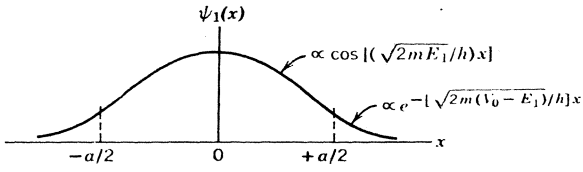


FIGURA 6-27

Las primeras eigenfunciones para un pozo cuadrado con paredes de altura moderada.

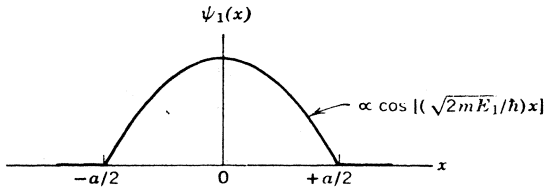


FIGURA 6-28
La primera eigenfunción de un pozo cuadrado con paredes de altura infinita.

muestra la primera eigenfunción para un pozo de potencial cuadrado. Conforme $V_0 \rightarrow \infty$, E_1 aumenta, pero lo hará muy lentamente comparado con el incremento de V_0. Esto es cierto debido a que E_1 está determinada esencialmente por el requisito de que aproximadamente la mitad de una oscilación de la eigenfunción deberá llenar la longitud del pozo. Por lo tanto el parámetro exponencial $k_{II} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, que determina el comportamiento de la eigenfunción en las regiones externas al pozo se hará muy grande conforme V_0 se hace muy grande y que la eigenfunción se irá a cero muy rápidamente en el exterior del pozo. En el límite $\psi_1(x)$ deberá ser cero para toda $x < -a/2$ y para toda $x > +a/2$. Para un pozo cuadrado con paredes infinitamente altas, $\psi_1(x)$ tiene la forma mostrada en la figura 6-28. Es evidente que estos argumentos son válidos para todas las eigenfunciones de este potencial, es decir, para todos los valores de n en un pozo de potencial cuadrado infinito

$$\psi_n(x) = 0 \qquad x \leq -a/2 \text{ o } x \geq +a/2 \quad (6\text{-}65)$$

Esta condición para las eigenfunciones del pozo cuadrado infinito solamente se pueden satisfacer si se violan en $x = +a/2$ los requisitos de que la derivada $d\psi_n(x)/dx$ de una eigenfunción sea continua en cualquier parte, pero si el estudiante revisa los argumentos que se presentaron para justificar el requisito, econtrará que la derivada sólo será continua cuando el potencial sea finito.

6.8 El potencial de pozo cuadrado infinito

El potencial de pozo cuadrado infinito se escribe como

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6\text{-}66)$$

y se muestra en la figura 6-29. Tiene la característica de ligar una partícula con cualquier energía total finita $E \geq 0$. *En la mecánica clásica cualesquiera* de estas energías son posibles, pero en la *mecánica cuántica* sólo son permitidos *ciertos* eigenvalores discretos E_n.

Se verá que es muy fácil encontrar expresiones simples y concisas para los eigenvalores y eigenfunciones de este potencial, debido a que la ecuación trascendente que aparece en la solución de su ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene soluciones simples. Para valores del número cuántico n que no sean muy grandes, es posible utilizar estos eigenvalores y eigenfunciones como eigenvalores y eigenfunciones aproximadas de un pozo de potencial cuadrado con V_0 grande, pero finita. Por ejemplo, con anterioridad se mencionó que es una muy buena aproximación tomar un pozo cuadrado finito como el potencial para un electrón de conducción en un bloque de metal. En el ejemplo 6-2 se mostró que para el *Cu* metálico las eigenfunciones penetran una distancia de aproximadamente 10^{-10} m en las

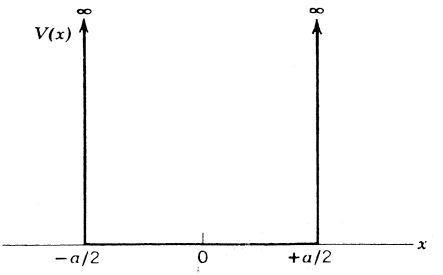


FIGURA 6-29
Pozo de potencial cuadrado infinito.

regiones clásicamente excluidas externas al pozo. Esta distancia es muy pequeña comparada con el ancho del pozo cuadrado, que es el ancho del bloque de *Cu*, que para muchos propósitos es una aproximación igualmente buena utilizar las eigenfunciones y eigenvalores correspondientes para un pozo cuadrado infinito. También se utilizarán pozos cuadrados de potencial infinito para estudiar las propiedades mecánico-cuánticas de un sistema de moléculas en un gas y otras partículas que se encuentran estrictamente confinadas en una caja de ciertas dimensiones. A una partícula que se mueve bajo la influencia de un potencial de pozo cuadrado infinito se le denomina con frecuencia *partícula en una caja.*

La *solución general* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la región interna de un pozo cuadrado infinito se puede escribir como la onda estacionaria (6-62), la cual se puede simplificar, eliminando las primas, a

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} kx + B \cos kx \qquad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad -a/2 \leq x \leq +a/2 \quad (6\text{-}67)$$

(Los estudiantes que se hayan saltado las secciones anteriores podrán ver que esta $\psi(x)$ representa una onda estacionaria, si observan que la función de onda asociada $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$ tiene nodos fijos y podrán verificar que la $\psi(x)$ es realmente una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo substituyéndola en (6-2). De acuerdo con la condición de (6-65), $\psi(x)$ tiene el valor cero en las regiones exteriores al pozo. Por supuesto que esto deberá ser cierto de modo que la densidad de probabilidad sea cero en estas regiones, ya que la partícula se encuentra estrictamente confinada dentro del pozo por sus paredes de potencial infinitamente altas. En particular, en las fronteras del pozo

$$\psi(x) = 0 \qquad x = \pm a/2 \quad (6\text{-}68)$$

Esto es, la onda estacionaria tiene nodos en las paredes de la caja.

Ahora se desarrollarán las relaciones a satisfacer por las constantes arbitrarias A y B y por el parámetro k. Aplicando las condiciones en la frontera (6-68) para $x = +a/2$ se obtiene

$$A \operatorname{sen}\frac{ka}{2} + B \cos\frac{ka}{2} = 0 \quad (6\text{-}69)$$

en $x = -a/2$, (6-68) produce

$$A \operatorname{sen}\left(-\frac{ka}{2}\right) + B \cos\left(-\frac{ka}{2}\right) = 0$$

o

$$-A \operatorname{sen}\frac{ka}{2} + B \cos\frac{ka}{2} = 0 \quad (6\text{-}70)$$

Sumando las dos últimas ecuaciones numeradas se tiene

$$2B \cos \frac{ka}{2} = 0 \tag{6-71}$$

Y restándolas

$$2A \operatorname{sen} \frac{ka}{2} = 0 \tag{6-72}$$

Tanto (6-71) como (6-72) deberán satisfacerse. Cuando esto se hace, $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ serán finitas en cualquier parte y monovaluadas y $\psi(x)$ será continua en cualquier parte. Como se discutió al final de sección anterior, $d\psi(x)/dx$ será discontinua en $x = \pm a/2$.

No existe valor del parámetro k para el cual,tanto $\cos(ka/2)$como $\operatorname{sen}(ka/2)$ sean cero simultáneamente y ciertamente no es deseable satisfacer estas dos ecuaciones haciendo A y B iguales a cero ya que entonces $\psi(x) = 0$ en todas partes y la eigenfunción no tendría interés porque la partícula asociada ¡no estaría en la caja! Sin embargo,estas ecuaciones se pueden satisfacer *ya sea* escogiendo k de modo que $\cos(ka/2)$ sea cero y poniendo A igual a cero, o escogiendo k de modo que $\operatorname{sen}(ka/2)$ sea cero y haciendo B igual a cero. Esto es, tomando cualesquiera

$$A = 0 \qquad \text{y} \qquad \cos \frac{ka}{2} = 0 \tag{6-73}$$

o

$$B = 0 \qquad \text{y} \qquad \operatorname{sen} \frac{ka}{2} = 0 \tag{6-74}$$

Entonces existen dos clases de soluciones.
Para la *primera clase*

$$\psi(x) = B \cos kx \qquad \text{donde} \quad \cos \frac{ka}{2} = 0 \tag{6-75}$$

Para la *segunda clase*

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} kx \qquad \text{donde} \quad \operatorname{sen} \frac{ka}{2} = 0 \tag{6-76}$$

Las condiciones sobre el número de onda k expresadas en (6-75) y (6-76), están en la forma de ecuaciones trascendentes ya que la incógnita k aparece en los argumentos de las senoides; pero ocurre que estas ecuaciones trascendentes son tan simples que sus soluciones se pueden escribir de inmediato en forma concisa. Los valores de k permitidos para la primera clase, (6-75), son

$$\frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \ldots$$

ya que $\cos(\pi/2) = \cos(3\pi/2) = \cos(5\pi/2) = \cdots = 0$. Es conveniente expresar esto como

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad n = 1, 3, 5, \ldots \tag{6-77}$$

Los valores permitidos de k para la segunda clase, (6-76), son

$$\frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots$$

ya que sen π = sen 2π = sen 3π = $\cdots$ = 0. Lo cual también se puede

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad n = 2, 4, 6, \ldots \quad (6\text{-}78)$$

Conociendo los valores permitidos de k se pueden obtener las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el pozo cuadrado infinito a partir de (6-75) y (6-76). Encontrándose

$$\psi_n(x) = B_n \cos k_n x \qquad \text{donde } k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad n = 1, 3, 5, \ldots \quad (6\text{-}79)$$

y

$$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen} k_n x \qquad \text{donde } k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad n = 2, 4, 6, \ldots \quad (6\text{-}80)$$

La solución correspondiente a $n = 0$ es $\psi_0(x) = A \operatorname{sen} 0 = 0$; la cual se excluye ya que no describe a una partícula en una caja. Se ha utilizado al número cuántico n para denotar las diferentes soluciones de las ecuaciones trascendentes y las eigenfunciones correspondientes. Si fuera necesario aplicar la condición de normalización, se podrían determinar las constantes A_n y B_n que especifican las amplitudes de las eigenfunciones (véase ejemplo 5-10), pero usualmente no es necesario el hacerlo.

El número cuántico n también se utiliza para denotar los eigenvalores correspondientes. Utilizando la relación $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ de (6-67) y la expresión $k_n = n\pi/a$ en (6-79) y (6-80) para los valores permitidos de k, se encuentra

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \qquad n = 1, 2, 3, 4, 5, \ldots \quad (6\text{-}81)$$

De lo cual se concluye que sólo son permitidos ciertos valores de la energía total E. La energía total de la partícula en la caja está *cuantizada*.

El tratamiento cuantitativo del pozo cuadrado finito estudiado en la sección anterior y desarrollado en el apéndice G es esencialmente el mismo que se ha seguido. Pero la penetración de la eigenfunción en las regiones exteriores al pozo, que varían con la energía del eigenvalor asociado, conducen a ecuaciones trascendentes para k más complicadas que las que se pueden resolver gráfica o numéricamente.

La figura 6-30 ilustra el pozo cuadrado de potencial infinito y sus primeros eigenvalores especificados por (6-81). Por supuesto que todos los eigenvalores están separados dis-

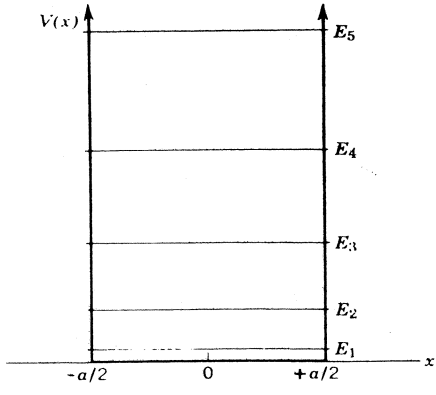


FIGURA 6-30

Los primeros eigenvalores de un pozo de potencial cuadrado infinito.

cretamente para un pozo de potencial infinito ya que la partícula está ligada para cualquier eigenvalor finito. Obsérvese que el patrón formado por los primeros tres eigenvalores del pozo cuadrado infinito es muy similar al formado por los tres eigenvalores ligados del pozo cuadrado finito mostrado en la figura 6-25. A este respecto, los resultados del pozo cuadrado infinito constituyen una aproximación a los resultados del pozo cuadrado finito. Sin embargo, en detalle cada función energía-potencial $V(x)$ tiene su propio conjunto característico de eigenvalores ligados E_n.

La energía del primer eigenvalor es particularmente interesante. Para el pozo cuadrado infinito es

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{6-82}$$

Que se llama la *energía del punto cero* y es la energía total más baja posible que puede tener la partícula si está ligada a la región $-a/2 \leq x \leq +a/2$ por el potencial del pozo cuadrado infinito. *La partícula no puede tener energía total cero.* El fenómeno es básicamente un resultado del principio de incertidumbre. Para ver esto considérese el hecho de que si la partícula está ligada por el potencial, entonces se conoce su coordenada x dentro de una incertidumbre de aproximadamente $\Delta x \simeq a$. En consecuencia, la incertidumbre en su impulso deberá ser al menos $\Delta p \simeq \hbar/2\Delta x \simeq \hbar/2a$. El principio de incertidumbre no puede permitir que la partícula esté ligada por el potencial con energía total cero ya que esto significaría que la incertidumbre en el impulso debería ser igual a cero.

Para el caso particular del eigenvalor E_1, la magnitud del impulso es $p_1 \simeq \sqrt{2mE_1} = \pi\hbar/a$. Puesto que la partícula está en un estado de movimiento descrito por una eigenfunción de onda estacionaria, se puede mover en cualquier dirección y el valor real del impulso es incierto por una cantidad que es aproximadamente $\Delta p \simeq 2p_1 \simeq 2\pi\hbar/a$. La incertidumbre producto $\Delta x\,\Delta p \simeq a2\pi\hbar/a \simeq 2\pi\hbar$ se ajusta muy bien con el límite inferior establecido por el principio de incertidumbre. (Compárese con el cálculo cuidadoso del ejemplo 5-10).

Se concluye que debe existir una energía del punto cero ya que debe existir un *movimiento del punto cero.* Esto está en franco contraste con la idea de la física clásica, de que todo movimiento cesa cuando un sistema tiene su energía mínima a la temperatura del cero absoluto. La energía del punto cero es responsable de muchos fenómenos cuánticos interesantes que se observan con el comportamiento de la materia a temperaturas muy bajas. Un ejemplo muy notorio es el hecho de que el helio no solidifica aún a la temperatura más baja alcanzable ($\sim$0.001°K) a menos que se aplique una presión alta.

En la figura 6-31 se muestran las primeras eigenfunciones del pozo potencial cuadrado infinito. Obsérvese que el número de mitades de longitudes de onda de cada eigenfunción es igual a su número cuántico n y por lo tanto el número de nodos es $n + 1$. Al comparar estas

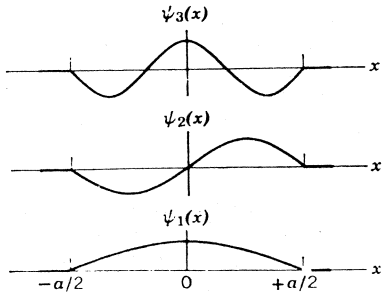


FIGURA 6-31

Primeras eigenfunciones para un pozo de potencial cuadrado infinito.

eigenfunciones con las correspondientes del pozo cuadrado finito mostradas en la figura 6-26, el estudiante puede ver nuevamente cómo los resultados que se obtienen para el potencial simple se pueden utilizar para aproximar a aquellos de potenciales más complicados (en forma más precisa, para eigenfunciones de n más baja).

El lector familiarizado con instrumentos musicales de cuerda podrá observar que las eigenfunciones para una partícula confinada estrictamente entre dos puntos en los extremos de la caja, se parecen a las funciones que describen las formas posibles que asumen las cuerdas vibrantes cuando tienen sus dos extremos fijos. La razón es que ambos sistemas están sujetos de forma análoga a ecuaciones diferenciales independientes del tiempo y que satisfacen condiciones análogas en los dos puntos. Aquí está otro ejemplo de la relación entre la mecánica cuántica y el movimiento ondulatorio clásico. Los estudiantes con inclinaciones musicales también podrán observar que las frecuencias $\nu_n = E_n/h$ del factor independiente del tiempo en las funciones de onda para la partícula confinada, satisfacen la relación $\nu_n \propto n^2$ (ya que $E_n = \pi^2\hbar^2n^2/2ma^2$), mientras que las frecuencias de la cuerda vibrante satisface la "progresión armónica" $\nu_n \propto n$. Esta diferencia proviene de que los dos sistemas obedecen ecuaciones diferenciales dependientes del tiempo que no son del todo análogas.

Ejemplo 6-5. Derivar la ley de cuantización de la energía para el pozo cuadrado infinito, (6-81), directamente de la relación de de Broglie $p = h/\lambda$ metiendo un número entero de mitades de longitudes de onda de de Broglie $\lambda/2$ en el ancho a del pozo.

De la figura 6-31 es evidente que las eigenfunciones del pozo cuadrado infinito satisfacen la relación siguiente entre las longitudes de onda de de Broglie y la longitud del pozo

$$n\frac{\lambda}{2} = a \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Esto es, en el pozo entran un número entero de mitades de longitud de onda, lo cual significa

$$\lambda = \frac{2a}{n} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Así que según de Broglie, los valores correspondientes al impulso de la partícula son

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hn}{2a} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Como la energía potencial de la partícula es cero dentro del pozo, su energía total es igual a su energía cinética. Entonces

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2n^2}{2m4a^2} = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

que concuerda con (6-81). Este cálculo trivial solamente se puede usar para el caso más simple de una partícula ligada, es decir el caso de un pozo de potencial cuadrado infinito, y no se puede aplicar para encontrar los eigenvalores o eigenfunciones de un potencial más complicado tal como el de un pozo cuadrado finito. (Véase también el análisis, en conexión con (4-25), de la aplicación de la regla de cuantización de Wilson-Sommerfeld para el pozo cuadrado infinito) ◀

Ejemplo 6-6. Antes del descubrimiento del neutrón se pensaba que un núcleo de número atómico Z y peso atómico A estaba compuesto de A protones y $(A\text{-}Z)$ electrones, pero existía un problema serio con la magnitud de la energía del punto cero para una partícula tan ligera como un electrón confinada a una región tan pequeña como un núcleo. Estimar la energía del punto cero E.

Poniendo la masa del electrón m igual a 10^{-30} kg y el ancho del pozo igual a 10^{-14}m (dimensiones nucleares típicas), se obtiene de (6-82)

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \simeq \frac{10 \times 10^{-68}\,\text{joule}^2\text{-seg}^2}{2 \times 10^{-30}\,\text{kg} \times 10^{-28}\,\text{m}^2} \simeq \frac{10^{-9}}{2}\,\text{joule}$$
$$\simeq \frac{10^{-9}\,\text{joule}}{2} \times \frac{1\,\text{eV}}{1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule}} \simeq 3 \times 10^9\,\text{eV}$$
$$= 3000\,\text{MeV}$$

Para estimar la energía del punto cero está plenamente justificado el tratar al electrón como si estuviera confinado a un pozo cuadrado infinito. También está justificado ignorar el carácter tridimensional del sistema real. Pero no estaría justificado el tomar el valor de E que se ha obtenido, ya que es extremadamente grande comparado con la energía de la masa en reposo del electrón $m_0c^2 \simeq 0.5$ MeV. En este problema en particular, deberá usarse un análogo de (6-82) válido desde el punto de vista relativista.

La fórmula requerida se puede obtener partiendo de la técnica utilizada en el ejemplo 6-5. Tanto la ecuación $\lambda = 2a/n$ como $p = h/\lambda$ mantienen su validez en el extremo del rango relativista. Así, si se substituye $E = p^2/2m$ por $E = cp$ (la relación $E^2 = c^2p^2 + m_0^2c^4$ energía impulso en el límite $E \gg m_0c^2$), se obtiene para $n = 1$

$$E = cp = \frac{ch}{\lambda} = \frac{chn}{2a} = \frac{\pi c\hbar}{a} \simeq \frac{3 \times 3 \times 10^8\,\text{m/seg} \times 10^{-34}\,\text{joule-seg}}{10^{-14}\,\text{m}}$$
$$\times \frac{1\,\text{eV}}{1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule}} \simeq 6 \times 10^7\,\text{eV} = 60\,\text{MeV}$$

Un electrón *podría* estar ligado con esta energía del punto cero en un núcleo, si la magnitud de la profundidad del pozo de potencial fuera mayor que la magnitud de la energía del punto cero. Hay un potencial de ligadura que actúa sobre el electrón debido a la atracción de Coulomb de la carga positiva del núcleo, pero la magnitud de potencial no es lo suficientemente grande. Esta magnitud se puede estimar tomando $r = 10^{-14}$ m, y $Q_1 = Ae$, $Q_2 = -e$ en la fórmula para el potencial de Coulomb donde e es la magnitud de la carga del electrón. Para un valor típico de $A = 100$, se obtiene

$$\frac{Q_1Q_2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ae^2}{4\pi\epsilon_0 r} \simeq -\frac{10^2 \times (1.6 \times 10^{-19}\,\text{coul})^2}{10^{-10}\,\text{coul}^2/\text{nt-m}^2 \times 10^{-14}\,\text{m}} \times \frac{1\,\text{eV}}{1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule}}$$
$$\simeq -1.6 \times 10^7\,\text{eV} = -16\,\text{MeV}$$

La cual es diez veces mas pequeña que la energía de enlace requerida. De modo que un electrón no puede estar ligado en un núcleo debido a la energía del punto cero requerida por el principio de incertidumbre.

En 1932 Chadwick motivado por una sugerencia de Rutherford descrubrió el neutrón. Ahora se sabe que un núcleo está compuesto por Z protones y $(A\text{-}Z)$ neutrones. Debido a que los neutrones, como los protones, son partículas pesadas, su energía del punto cero en un núcleo es relativamente baja como para que puedan ligarse sin dificultad. En efecto, como se verá en el capítulo 15, algunas de las propiedades más importantes de los núcleos se pueden explicar en términos de los estados cuánticos de los neutrones y protones que se mueven en un pozo cuadrado de potencial (finito). ◀

La figura 6-31 pone de relieve la diferencia esencial entre las dos clases de eigenfunciones de onda estacionaria especificadas por (6-79) y (6-80). Las eigenfunciones de la primera clase $\psi_1(x)$, $\psi_3(x)$, $\psi_5(x)$, . . son *funciones pares* de x; esto es

$$\psi(-x) = +\psi(x) \tag{6-83}$$

En la mecánica cuántica se dice que estas funciones tienen *paridad par*. Las eigenfunciones de segunda clase $\psi_2(x)$, $\psi_4(x)$, $\psi_6(x)$, . . , son *funciones impares de x*; esto es

$$\psi(-x) = -\psi(x) \tag{6-84}$$

y se dice que tienen *paridad impar*.

Las eigenfunciones tienen una *paridad definida*, ya sea par o impar, ya que el origen del eje x se ha escogido de modo que el potencial de pozo cuadrado *simétrico* $V(x)$ sea una función *par* de x. Obsérvese que si se vuelve a definir el origen del eje x, en la figura 6-31 por ejemplo situándolo en el punto $x = -a/2$, las eigenfunciones ya no tendrán una paridad definida.

Estos resultados se obtienen para el potencial de pozo cuadrado y para cualesquiera otros potenciales simétricos, ya que las cantidades mensurables que describen el movimiento de una partícula en estados *ligados* de estos potenciales también deberán ser simétricos alrededor del punto de simetría del potencial. Si se escoge el origen del eje x en el punto de simetría, entonces la función que describe la cantidad mensurable deberá ser una función par. Por ejemplo, esto es cierto para la función densidad de probabilidad $P(x,t)$, tanto para las eigenfunciones con paridad par como para las de paridad impar, ya que

$$P(-x,t) = \psi^*(-x)\psi(-x) = [\pm\psi^*(x)][\pm\psi(x)] = \psi^*(x)\psi(x) = P(x,t) \quad (6\text{-}85)$$

Esto no es cierto para la función de onda misma en el caso de una eigenfunción con paridad impar; esa función de onda es una función impar de x, pero esto no es una contradicción ya que la función de onda misma no es mensurable. Las eigenfunciones para estados *no ligados* de potenciales que son funciones pares de x no tienen necesariamente paridades definidas ya que ellas no describen necesariamente movimientos simétricos de las partículas.

En una dimensión, el hecho de que eigenfunciones de onda estacionaria tengan paridades definidas, si $V(-x) = V(x)$, es de gran importancia ya que esto simplifica ciertos cálculos. En tres dimensiones, la propiedad tiene un significado más profundo como se verá en el capítulo 8 en conexión con la emisión de radiación por un átomo que realiza una transición de un estado excitado a su estado base.

Las funciones de densidad de probabilidad correspondientes a las primeras eigenfunciones del pozo cuadrado infinito están esquematizadas en la figura 6-32, en la cual también se ilustra la densidad de probabilidad que predeciría la mecánica clásica para una partícula que rebota hacia adelante y hacia atrás entre $-a/2$ y $+a/2$. Puesto que la partícula clásica invertiría una cantidad de tiempo igual en cualquier elemento del eje x en esta región, sería igualmente probable encontrarla en cualesquiera de estos elementos. La densidad de probabilidad en la mecánica cuántica oscila más y más conforme n crece. En el límite en el que n tiende a infinito, esto es para eigenvalores de muy alta energía, las oscilaciones están tan comprimidas que no hay experimento que pueda tener la resolución para observar otra cosa que el comportamiento promedio de la densidad de probabilidad predicha por la mecánica cuántica.

Además, la separación fraccionaria de los eigenvalores se aproxima a cero conforme n se aproxima a infinito, de modo que en el límite no es posible resolver su discreticidad. Por lo tanto se ve que las predicciones de la mecánica cuántica se aproximan a las predicciones de la mecánica clásica en el límite de números cuánticos grandes o alta energía; lo cual era de esperarse del principio de correspondencia de la teoría cuántica antigua.

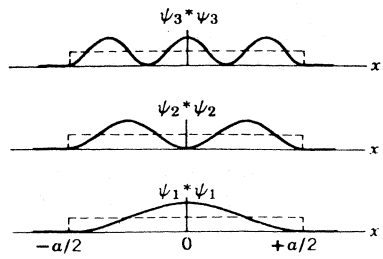


FIGURA 6-32

Las primeras funciones de densidad de probabilidad para un pozo de potencial cuadrado infinito. Las curvas punteadas son las predicciones de la mecánica clásica.

6.9 El potencial de oscilador armónico simple

Se han estudiado varios potenciales que son funciones discontinuas de la posición con valores constantes en las regiones adyacentes. Ahora se regresará al caso más realista de potenciales que son funciones continuas de la posición. Resulta que sólo existen un número limitado de estos potenciales para los cuales es posible obtener soluciones a la ecuación de Schrödinger por técnicas analíticas. Pero, afortunadamente, estos potenciales incluyen algunos de los casos más importantes, tales como el potencial de Coulomb, $V(r) \propto r^{-1}$, que se analizará en el capítulo siguiente y el potencial de oscilador armónico simple $V(x) \propto x^2$ que se analizará en esta sección. (A este respecto le recordamos al lector que las soluciones a las ecuaciones de Schrödinger para potenciales de *cualquier* forma siempre se pueden obtener mediante las técnicas numéricas desarrolladas en el apéndice F).

Debido a que el oscilador armónico simple es el prototipo para cualquier sistema oscilatorio, es de tremenda importancia en la física y en todos los campos basados en la física. Por ejemplo, se le utiliza en el estudio de vibraciones de átomos en moléculas **diatómicas**, las propiedades acústicas y térmicas de sólidos que provienen de vibraciones atómicas, propiedades magnéticas de sólidos, lo cual incluye vibraciones en la orientación del núcleo y la electrodinámica de sistemas cuánticos en los cuales las ondas electromagnéticas están vibrando. Dicho en general, el oscilador armónico simple se puede utilizar para describir casi cualquier sistema en el cual una entidad ejecute *vibraciones pequeñas* alrededor de un punto de *equilibrio estable.*

En una posición de equilibrio estable la función potencial $V(x)$ deberá tener un mínimo. Puesto que cualquier función potencial realista es continua, la función en la región cercana al mínimo casi siempre se puede aproximar por una parábola tal como se ilustra en la figura 6-33. Pero para vibraciones *pequeñas* lo único que cuenta es que $V(x)$ está próxima a su mínimo. Si se escogen los orígenes del eje x y del eje de la energía en el mínimo la ecuación para esta función potencial parabólica se puede escribir como

$$V(x) = \frac{C}{2} x^2 \tag{6-86}$$

donde C es una constante. En la figura 6-34 se muestra este potencial. Una partícula que se mueve bajo su influencia experimenta una fuerza restauradora lineal (o ley de Hooke) $F(x) = -dV(x)/dx = -Cx$, donde C es la constante de fuerza.

La mecánica clásica predice que una partícula bajo la influencia de la fuerza restauradora lineal ejercida por el potencial (6-86) y desplazada una cantidad x_0 de la posición de equilibrio, oscilará en un movimiento armónico simple alrededor de la posición de equilibrio con frecuencia

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{C}{m}} \tag{6-87}$$

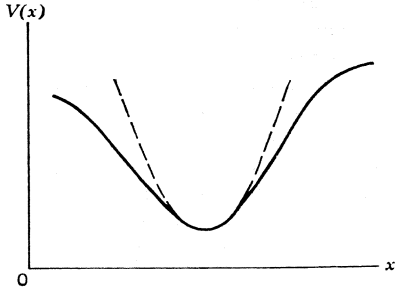


FIGURA 6-33

Ilustración del hecho de que cualquier potencial continuo con un mínimo (curva continua) se puede aproximar en las cercanías del mínimo por un potencial parabólico (curva punteada).

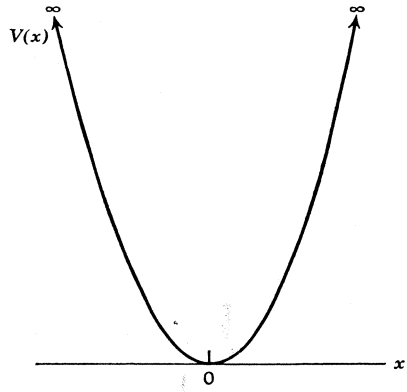


FIGURA 6-34
Potencial de oscilador armónico simple.

donde m es su masa. Según esta teoría, la energía total E de la partícula es proporcional a x_0^2, y puede tener *cualquier* valor ya que x_0 *es arbitraria.*

La mecánica cuántica predice que la energía total E puede tomar *solamente* un conjunto discreto de valores ya que la partícula está ligada por el potencial a una región de extensión finita, resultado que era conocido aún en la teoría cuántica antigua. El lector recordará que el postulado de Planck predice que la energía de una partícula que ejecuta oscilaciones armónicas simples solamente puede tomar uno de los valores

$$E_n = nh\nu \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \quad (6\text{-}88)$$

¿Cuáles son los valores de la energía permitidos que predice la mecánica cuántica de Schrödinger para este potencial tan importante? Para responderlo, se deberá resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial de oscilador armónico simple.

Las matemáticas utilizadas en la solución analítica de la ecuación no son difíciles y si muy interesantes; pero ya que la solución es muy larga se han reservado para el apéndice H. En vez de verificar por substitución una eigenfunción típica y obtener un eigenvalor de la solución, nos concentraremos en describir los resultados de la solución y analizar su significado físico.

Se encuentra que los eigenvalores para el potencial de oscilador armónico simple están dados por la fórmula

$$E_n = (n + 1/2)h\nu \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \quad (6\text{-}89)$$

donde ν es la frecuencia de oscilación clásica de la partícula en el potencial. Todos los eigenvalores son discretos ya que para cualquiera de ellos la partícula está ligada. En la figura 6-35 se muestran el potencial y los eigenvalores.

Si se comparan los resultados de Schrödinger con el postulado de Planck se ve que en la mecánica cuántica todos los eigenvalores están corridos por una cantidad $h\nu/2$. Como una consecuencia la energía total mínima posible para una partícula ligada al potencial es $E_0 = h\nu/2$ que es la energía del punto cero para el potencial y cuya existencia es requerida por el principio de incertidumbre. Por lo tanto, la cuantización de la energía del oscilador armónico simple según Planck está equivocada por la constante aditiva $h\nu/2$. Esta constante se cancela en la mayoría de las aplicaciones del postulado de Planck ya que en ellas sólo se utilizan diferencias entre dos valores de la energía. Como ejemplo considere la radiación electromagnética emitida por la vibración de la distribución de carga de una molécula diatómica cuyo espacio interatómico ejecuta oscilaciones armónicas simples. Como las frecuencias de los

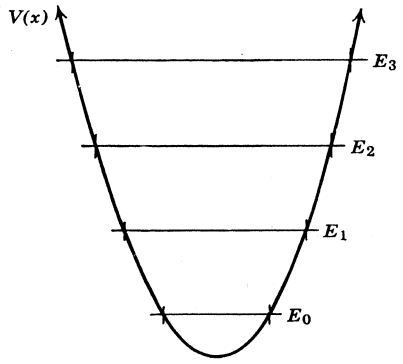


FIGURA 6-35

Primeros eigenvalores del potencial de oscilador armónico simple. Observa que las regiones clásicamente permitidas (entre las intersecciones de $V(x)$ y E_n) se expanden conforme crecen los valores de E_n.

fotones emitidos sólo dependen de las diferencias en las energías permitidas de la molécula, la constante aditiva no tiene efecto sobre las *frecuencias* de los fotones.

Sin embargo, existen cantidades observables que muestran que el postulado de Planck está equivocado ya que no contiene la energía del punto cero. El ejemplo más importante también está conectado con la emisión de radiación por una molécula o átomo vibrante. Cuando se estudie este material en un capítulo posterior, se verá que la rapidez *de emisión* de los fotones no concuerda con los experimentos a menos que los osciladores armónicos simples tengan energía del punto cero. De hecho, se encontrará que la única razón por la que la molécula emite *cualquier* radiación es que sus vibraciones han sido estimuladas por un campo electromagnético circundante cuya intensidad de campo realiza oscilaciones armónicas simples debido a la energía del punto cero del campo.

Además de proporcionar eigenvalores totalmente correctos, la mecánica cuántica también proporciona las eigenfunciones para el oscilador armónico simple. Las eigenfunciones ψ_n que corresponden a los primeros eigenvalores E_n, se enlistan en la tabla 6-1 y se grafican en la figura 6-36. Las eigenfunciones están expresadas en términos de la variable adimensional $u = [(Cm)^{1/4}/\hbar^{1/2}]x$, que sólo difiere de x por una constante de proporcionalidad que depende de las propiedades del oscilador. Para todos los valores de x, la eigenfunción está dada por el producto de una exponencial, cuyo exponente es proporcional a $-x^2$, por un polinomio simple de orden x^n. El polinomio es el causante del comportamiento oscilatorio de ψ_n en la región clásicamente permitida en la que $E_n < V(x)$. El número de oscilaciones aumenta conforme aumenta n ya que existen n valores de x para los cuales un polinomio de orden x^n tiene el valor cero. Estos valores de x son la localización de los nodos de ψ_n. Las regiones clásicamente

TABLA 6-1. Algunas eigenfunciones $\psi(u)$ para el potencial de oscilador armónico simple donde u está relacionada con la coordenada x por la ecuación $u = [(Cm)^{1/4}/\hbar^{1/2}]x$

Número cuántico	Eigenfunciones
0	$\psi_0 = A_0 e^{-u^2/2}$
1	$\psi_1 = A_1 u e^{-u^2/2}$
2	$\psi_2 = A_2(1 - 2u^2)e^{-u^2/2}$
3	$\psi_3 = A_3(3u - 2u^3)e^{-u^2/2}$
4	$\psi_4 = A_4(3 - 12u^2 + 4u^4)e^{-u^2/2}$
5	$\psi_5 = A_5(15u - 20u^3 + 4u^5)e^{-u^2/2}$

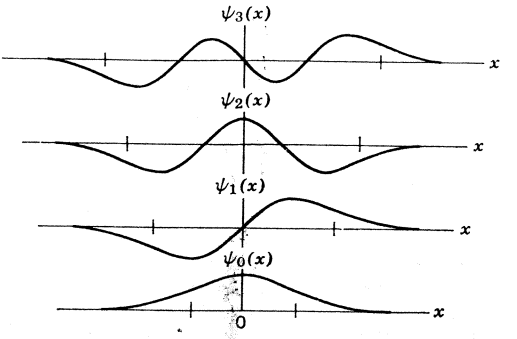


FIGURA 6-36

Primeras eigenfunciones del potencial de oscilador armónico simple. Las marcas verticales sobre el eje x indican los límites del movimiento clásico mostrados en la figura 6-35.

permitidas se encuentran en el interior de las marcas verticales mostradas en la figura 6-36. Estas regiones se hacen más anchas al crecer n debido a la forma del potencial de oscilador armónico simple $V(x)$, como puede verse analizando la figura 6-35 donde también se indican las regiones clásicamente permitidas para cada E_n. Fuera de estas regiones las eigenfunciones decrecen muy rápidamente debido a que su comportamiento se ve dominado por la exponencial decreciente. Puesto que el potencial satisface la relación $V(-x) = V(x)$ se espera que sus eigenfunciones tengan paridades definidas. Una inspección a la tabla 6-1 muestra que esto es cierto y que la paridad es par para n par e impar para n impar. Entonces, la eigenfunción para la energía permitida más baja es de paridad par como en el caso de un pozo de potencial cuadrado. Las constantes multiplicativas A_n determinan las amplitudes de las eigenfunciones. Si fuera necesario, se puede utilizar el procedimiento de normalización para fijar sus valores, como en el ejemplo (5-7) pero usualmente no es necesario.

Las eigenfunciones de oscilador armónico simple contienen una gran cantidad de información acerca del comportamiento del sistema, parte de la cual se obtuvo en el capítulo 5. Por ejemplo, las figuras 5-3 y 5-18 dieron una representación cuidadosa de las funciones de densidad de probabilidad para los estados cuánticos del oscilador $n = 1$ y $n = 13$. En el capítulo 8 se mostrará cómo se pueden utilizar las eigenfunciones para calcular las velocidades de emisión de radiación de un oscilador armónico simple cargado y derivar la regla de selección $n_i - n_f = \pm 1$ que hubo de introducirse en la teoría cuántica antigua mediante argumentos basados en el casi increible principio de correspondencia.

Ejemplo 6-7. Debido a que las eigenfunciones de oscilador armónico simple para n pequeñas tienen formas matemáticas simples no es muy difícil verificar por substitución directa que satisfacen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial (6-86) y para los eigenvalores de (6-89). Hacer esta verificación para $n = 1$. (Para $n = 0$ la función de onda se verificó por substitución directa en la ecuación de Schrodinger.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{C}{2}x^2\psi = E\psi$$

Para verificar que el eigenvalor

$$E_1 = \frac{3}{2}h\nu = \frac{3}{2}\frac{h}{2\pi}\left(\frac{C}{m}\right)^{1/2} = \frac{3}{2}\hbar\left(\frac{C}{m}\right)^{1/2}$$

y la eigenfunción

$$\psi_1 = A_1 u e^{-u^2/2} \qquad \text{donde } u = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}x$$

satisfacen la ecuación, se evalúan las derivadas

$$\frac{d\psi_1}{dx} = \frac{du}{dx}\frac{d\psi}{du} = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}\left[A_1 e^{-u^2/2} + A_1 u(-u)e^{-u^2/2}\right] - \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} A_1 e^{-u^2/2}[1 - u^2]$$

y

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} &= \frac{du}{dx}\frac{d}{du}\frac{d\psi_1}{dx} = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}\left\{\frac{d}{du}\frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} A_1 e^{-u^2/2}[1 - u^2]\right\} \\ &= \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} A_1\{-ue^{-u^2/2}[1 - u^2] + e^{-u^2/2}[-2u]\} \\ &= \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} A_1 ue^{-u^2/2}\{u^2 - 3\} \\ &= \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar}\{u^2 - 3\}\psi_1 = \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar}\left\{\frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar}x^2 - 3\right\}\psi_1\end{aligned}$$

La substitución de $d^2\psi_1/dx^2$ y E_1 en la ecuación que se supone que satisface, conduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar}\left\{\frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar}x^2 - 3\right\}\psi_1 + \frac{C}{2}x^2\psi_1 = \frac{3\hbar}{2}\left(\frac{C}{m}\right)^{1/2}\psi_1$$

Puesto que la inspección muestra que se satisface, la verificación está completa.

◀

6.10 Resumen

En la tabla 6-2 se resumen algunas de las propiedades de los sistemas estudiados en este capítulo. La tabla da un nombre abreviado a cada sistema idealizado y un ejemplo de un sistema físico cuyo potencial y energía total están aproximados por aquél. También proporciona esquemas de las formas del potencial y energías totales y las correspondientes funciones de densidad de probabilidad para cada sistema. Si la partícula no está ligada, incide desde la izquierda. Se ha escogido un rasgo significativo para enlistar cada sistema en la tabla, pero existen muchos otros rasgos significativos que se han estudiado y no se han enlistado. De hecho, en este capítulo se han obtenido la mayoría de las predicciones importantes de la mecánica cuántica para sistemas que contienen una partícula que se mueve en un potencial unidimensional. En los capítulos siguientes se obtendrán predicciones a partir de la teoría para sistemas tridimensionales y de muchas partículas.

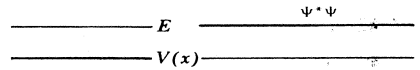
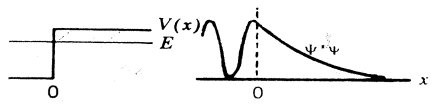
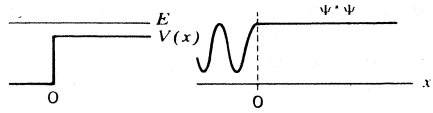
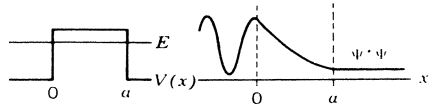
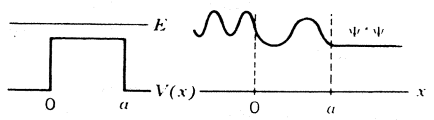
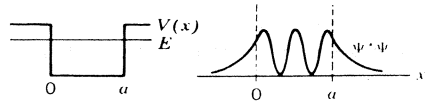
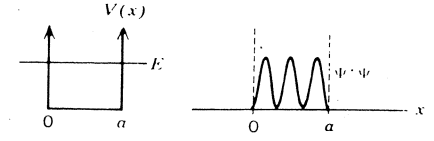
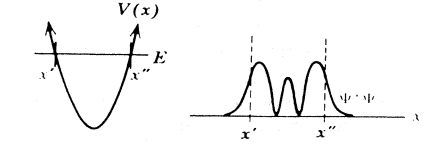
PREGUNTAS

1. ¿Puede haber soluciones a la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo con $E < 0$ para el potencial cero?

2. ¿Por qué en la mecánica clásica nunca es posible tener $E < V(x)$? ¿Por qué en la mecánica cuántica si es posible siempre que exista alguna región en la cual $E > V(x)$?

3. Explicar por qué la solución general a una ecuación de Schrödinger independiente del tiempo unidimensional contiene dos funciones distintas, mientras que la solución general a la ecuación de Schrödinger correspondiente contiene muchas funciones distintas.

TABLA 6-2. Resumen de los sistemas estudiados en el capítulo 6.

Nombre del sistema	Ejemplo físico	Energías potencial y total	Densidad de probabilidad	Rasgo importante
Potencial cero	Protón en haz de un ciclotrón			Resultados utilizados por otros sistemas
Potencial escalón (energía bajo la cima)	Electrón de conducción cerca de la superficie del metal			Penetración de la región excluida
Potencial escalón (energía abajo de la cima)	Neutrón intentando escapar del núcleo			Reflexión parcial en la discontinuidad del potencial
Barrera de potencial (energía bajo la cima	Partícula tratando de escapar de la barrera de Coulomb			Tunelamiento
Barrera potencial (energía debajo de la cima)	Dispersión de electrón por átomo ionizado negativamente			No hay reflexión para ciertas energías
Pozo de potencial cuadrado finito	Neutrón ligado al núcleo			Cuantización de la energía
Pozo de potencial cuadrado infinito	Molécula estrictamente confinada a la caja			Aproximación al pozo cuadrado finito
Potencial de oscilador armónico simple	Atomo de molécula diatómica vibrante			Energía del punto cero

4. Considérese una partícula en un haz cuyo impulso se conoce con mucha precisión. Una función de onda en la forma de un grupo proporciona una descripción de la partícula, más o menos realista, que la de una función de onda exponencial compleja como la (6-9).

5. ¿Bajo qué condiciones una función potencial discontinua es una aproximación razonable a un sistema real?

6. Si una función potencial tiene una discontinuidad en cierto punto, ¿sus eigenfunciones tienen discontinuidades en ese punto? Si la respuesta es no, ¿Por qué?

7. Combinando ondas de igual amplitud y que viajan en direcciones opuestas se obtiene una onda estacionaria. ¿Qué tipo de onda se obtendrá si las amplitudes no son iguales?

8. ¿Qué es un flujo de probabilidad y por qué es útil?

9. ¿Cómo es posible que un flujo de probabilidad se desdoble en una discontinuidad del potencial no obstante que su partícula asociada no se desdobla?

10. ¿Existe una analogía entre el desdoblamiento de un flujo de probabilidad que caracteriza el comportamiento de una partícula no ligada en un sistema unidimensional y los caminos alternativos que puede seguir una partícula no ligada que se mueve en dos dimensiones a través de un aparato de difracción? ¿Por qué?

11. ¿Qué significa exactamente la afirmación de que el coeficiente de reflexión es igual a uno para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total menor que la altura del escalón? ¿Qué significa la afirmación de que el coeficiente de reflexión es menor que uno si la energía total es mayor que la altura del escalón? ¿El coeficiente de reflexión puede ser mayor que uno?

12. Puesto que la exponencial real es una función no oscilatoria, ¿por qué una exponencial compleja es una función oscilatoria?

13. ¿Qué es lo que usted piensa que causan las oscilaciones rápidas en el grupo de funciones de onda de la figura 6-8 cuando se ven reflejadas por el potencial escalón?

14. ¿Cuál es el error en la siguiente afirmación? "Puesto que no es posible detectar una partícula mientras hace un túnel a través de la barrera, no tiene sentido decir que el proceso ocurre realmente".

15. Una partícula incide sobre una barrera de potencial con energía total menor que la altura de la barrera y se ve reflejada. ¿La reflexión sólo se debe a la discontinuidad del potencial que se enfrenta a la dirección de incidencia? Si se quitara la otra discontinuidad, de manera que la barrera cambiara a un escalón, ¿cambiaría el coeficiente de reflexión?

16. En el sol, dos núcleos de masa pequeña en un movimiento térmico violento pueden chocar penetrando la barrera de Coulomb que los separa. La masa del núcleo que se forma es menor que la suma de las masas de los dos núcleos, de modo que hay energía liberada. Este proceso de *fusión* es el responsable del calor que emerge del sol. ¿Cuáles serían las consecuencias sobre la vida de la tierra si esto no pudiera ocurrir porque las barreras fueran impenetrables?

17. ¿Existen algunas consecuencias *mensurables* de la penetración de una región clásicamente excluida que es de longitud infinita? Considérese una partícula ligada en un pozo de potencial cuadrado finito.

18. Demuestre, a partir de un argumento cualitativo, que un pozo de potencial cuadrado infinito unidimensional siempre tiene un eigenvalor ligado sin importar qué tan poco profunda sea la región de ligadura. ¿Cómo se vería la eigenfunción si la región de ligadura fuera muy superficial?

19. ¿Por qué los pozos cuadrados finitos sólo tienen un número finito de eigenvalores ligados? ¿Cuáles son las características de los eigenvalores no ligados?

20. ¿Cómo se vería una eigenfunción de onda estacionaria para un eigenvalor no ligado de un pozo cuadrado finito?

21. ¿Por qué los eigenvalores y las eigenfunciones más bajas de un pozo cuadrado infinito proporcionan la mejor aproximación a los eigenvalores y eigenfunciones correspondientes de un pozo cuadrado finito?

22. En el estado $n = 3$, la función densidad de probabilidad para una partícula en una caja es cero en dos posiciones entre las paredes de la caja. ¿Entonces cómo puede moverse la partícula a través de estas posiciones?

23. Explicar en términos simples la relación entre la energía del punto cero y el principio de incertidumbre.

24. ¿Esperaría usted que la energía del punto cero tuviera mucho efecto sobre la capacidad calorífica de la materia a temperaturas muy bajas? Justifique su respuesta.

25. Si las eigenfunciones de un potencial tienen paridades definidas, la energía más baja siempre tiene paridad par. Explique por qué.

26. ¿Existen analogías en la física clásica para el concepto de paridad de la mecánica cuántica?

27. ¿Existen estados no ligados para un potencial de oscilador armónico simple? ¿Cuántos estados ligados existen? ¿Qué tan realista es el potencial?

28. Explicar todos los aspectos del comportamiento de todas las densidades de probabilidad de la tabla 6-2; en particular explicar la densidad de probabilidad para la barrera de potencial con energía superior a su cima.

29. ¿Cuáles son los otros rasgos significativos de los sistemas de la tabla 6-2?

30. Considerando separadamente cada uno de los sistemas tratados en este capítulo, establecer cuáles de sus propiedades están de acuerdo y cuáles en desacuerdo con la mecánica clásica en el límite microscópico. Cuáles concuerdan y cuáles no concuerdan con el movimiento ondulatorio clásico en ese límite. Hacer las mismas clasificaciones para las propiedades de los sistemas en el límite macroscópico.

PROBLEMAS

1. Demostrar que la eigenfunción del potencial escalón, para $E < V_0$ se puede convertir de la suma de dos ondas viajeras, como en (6-24), a una onda estacionaria como en (6-29).

2. Repetir los cálculos de la sección (6-24) para el potencial escalón, pero con la partícula inicialmente en la región $x > 0$ donde $V(x) = V_0$, viajando en la dirección en la que x decrece hacia el punto $x = 0$ donde el potencial escalón baja a su valor $V(x) = 0$ en la región $x < 0$. Demostrar que los coeficientes de transmisión y de reflexión son los mismos que los obtenidos en la sección (6-4).

3. Probar (6-43) partiendo de que la suma de los coeficientes de reflexión y de transmisión es igual a uno para el caso de un potencial escalón con $E > V_0$.

4. Probar (6-44) que expresa los coeficientes de reflexión y transmisión en términos de la razón E/V_0.

5. Considérese una partícula que pasa por efecto túnel a través de una barrera de potencial rectangular. Escribir las soluciones generales presentadas en la sección 6-5 que proporcionan la forma para ψ en las distintas regiones del potencial. (a) Encontrar cuatro relaciones entre las cinco constantes arbitrarias acoplando ψ y $d\psi/dx$ en las fronteras entre las regiones. (b) Utilice estas relaciones para evaluar el coeficiente de transmisión T, verificando así (6-49). (Sugerencia: primero elimine F y G dejando las relaciones entre A, B y C; a continuación elimine B.)

6. Demostrar que la expresión (6-49) para el coeficiente de transmisión cuando hay tunelamiento a través de una barrera de potencial rectangular se reduce a la forma mostrada en (6-50) si los exponentes son muy grandes.

7. Considere una partícula que pasa sobre una barrera de potencial rectangular. Escriba la solución general presentada en la sección 6-5 que da la forma para ψ en las distintas regiones del potencial. (a) Encontrar cuatro relaciones entre las cinco constantes arbitrarias acoplando ψ y $d\psi/dx$ en las fronteras entre las regiones. (b) Utilice estas relaciones para evaluar el coeficiente de transmisión T, verificando así (6-51). (Sugerencia: observe que las cuatro relaciones se hacen exactamente las mismas que las encontradas en la primera parte del problema 5 si se substituye k_{II} por ik_{III}. Haga esta substitución en (6-49) para obtener directamente (6-51).

8. (a) Evaluar el coeficiente de transmisión para un electrón de energía total 2 eV que incide sobre una barrera de potencial rectangular de altura 4eV y espesor 10^{-10} utilizando (6-49) y enseguida (6-50). (b) Repetir la evaluación para una barrera de ancho 10^{-9} m.

9. Un protón y un deuterón (una partícula con la misma carga que un protón pero con el doble de masa) intentan penetrar una barrera de potencial de altura 10 MeV y ancho 10^{-14} m. Ambas partículas tienen una energía total de 3 MeV. (a) Mediante argumentos cualitativos pronostique cuál de las partículas tiene mayor probabilidad de éxito. (b) Evaluar cualitativamente la probabilidad de éxito para ambas partículas.

10. Una reacción de fusión muy importante para la producción de energía solar (ver pregunta 16) involucra la captura de un protón por un núcleo de carbón, el cual tiene seis veces la carga de un protón y un radio $r' \simeq 2 \times 10^{-15}$ m. (a) Estimar el potencial de Coulomb V que experimenta el protón si está en la superficie del núcleo. (b) El protón incide sobre el núcleo debido a su movimiento térmico. En forma realista no se puede suponer que su energía total es mucho mayor que $10\,kT$, donde k es la constante de Boltzmann (ver capítulo 1) y donde T es la temperatura interna del sol de alrededor de 10^7 °K. Estimar esta energía total y compararla con la altura de la barrera de Coulomb. (c) Calcular la probabilidad de que el protón pueda penetrar una barrera de potencial rectangular de altura V que se extiende desde r' hasta $2r'$ punto en el cual la barrera de potencial de Coulomb cae a $V/2$. (d) ¿La penetración a través de la barrera de potencial de Coulomb real es mayor o menor que a través de la barrera de potencial rectangular de la parte (c)?

11. Verificar, por substitución, que la solución general en ondas estacionarias (6-62), satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-2), para el caso de un pozo de potencial cuadrado finito en la región interior del pozo.

12. Verificar, por substitución, que las soluciones generales en términos de exponenciales,(6-63) y (6-64) satisfacen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-13) para el pozo de potencial cuadrado finito en las regiones exteriores al pozo.

13. (a) A partir de argumentos cualitativos haga un esquema de la forma de una eigenfunción de *onda estacionaria* típica para un pozo de potencial cuadrado finito. (b) ¿La amplitud de la oscilación es la misma para todas las regiones? (c) ¿Cuál es el comportamiento de la amplitud predicha alrededor de las probabilidades de encontrar la partícula en una longitud unitaria del eje x en las distintas regiones? (d) ¿La predicción está de acuerdo con lo que se esperaría de la mecánica clásica?

14. Utilice los argumentos cualitativos del Problema 13 para desarrollar una condición sobre la energía total de la partícula en un estado no ligado de un pozo de potencial cuadrado finito, que hace que la probabilidad de encontrar a la partícula en una unidad de longitud del eje x sea la misma tanto fuera como dentro del pozo. (Sugerencia: Lo importante es la relación entre la longitud de onda de de Broglie en el interior del pozo y el ancho del mismo).

15. (a) Haga un cálculo cuantitativo del coeficiente de transmisión para una partícula no ligada que se mueve sobre un pozo de potencial cuadrado finito. (Sugerencia: utilice un truco similar al indicado en el problema 7). (b) Encontrar una condición sobre la energía total de la partícula que haga que el coeficiente de transmisión sea igual a uno. (c) Compare con la condición que se encontró en el problema 14 y explique por qué son las mismas (d) Proporcione un ejemplo de un análogo óptico de este sistema.

16. Un átomo del gas noble criptón ejerce un potencial atractivo sobre un electrón no ligado que tiene un comienzo muy brusco. Debido a ello resulta una aproximación razonable el describir el potencial

como un pozo cuadrado atractivo de radio igual al radio del átomo de 4×10^{-10} m. Los experimentos demuestran que un electrón de energía cinética 0.7 eV en regiones exteriores al átomo puede viajar a través de él sin que existan reflexiones esenciales. Al fenómeno se le denomina *efecto Ramsauer*. Utilice esta información en las condiciones del problema 14 o 15 para determinar la profundidad del pozo cuadrado. (Sugerencia: una de las longitudes de onda de de Broglie cabe justo en el ancho del pozo. ¿Por qué no la mitad de la longitud de onda de de Broglie?)

17. Obtener una solución analítica, como en el apéndice G, para encontrar los primeros eigenvalores del potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < -a/4 \text{ o } +a/4 < x < +a/2 \\ v_0 & -a/4 < x < +a/4 \end{cases}$$

donde

$$v_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Comparar con la integración numérica del problema 31 del capítulo 5. (Sugerencia: (i) debido a la simetría de $V(x)$ la primera eigenfunción ψ deberá ser de paridad par. Esto significa que no puede haber un término senoidal en la forma supuesta para ψ en la región $-a/4 < x < +a/4$ que circunda a $x = 0$. (ii). Debido a esta simetría, solamente es necesario acomplar ψ y $d\psi/dx$ en $x = +a/4$, y hacer $\psi = 0$ en $x = +a/2$).

18. Verificar, por substitución, que la solución general en términos de ondas estacionarias (6-67), satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-2), para el pozo de potencial cuadrado infinito en la región interior del pozo.

19. En la figura (6-37) se muestran dos posibles eigenfunciones para una partícula que se mueve libremente en una región de longitud a pero que está confinada estrictamente a esta región. Cuando la partícula está en el estado que corresponde a la eigenfunción ψ_I, su energía total es 4eV. (a) ¿Cuál es la energía total correspondiente al estado ψ_{II}? ¿Cuál es la energía total más baja posible para la partícula en este sistema?

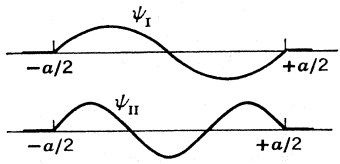


FIGURA 6-37
Dos eigenfunciones consideradas en el problema 19.

20. (a) Estimar la energía del punto cero para un neutrón en un núcleo tratándolo como si estuviera en un pozo cuadrado infinito de ancho igual al diámetro nuclear de 10^{-14} m. (b) Compare su respuesta con la energía del punto cero del electrón del ejemplo 6-6.

21. (a) Resuelva la ecuación de onda clásica que gobierna las vibraciones de una cuerda tensa y fija por ambos extremos. Demuestre que la funciones que describen las formas posibles que adopta la cuerda son esencialmente las mismas que las eigenfunciones para un pozo potencial cuadrado. (b) También demuestre que las posibles frecuencias de vibración de la cuerda son esencialmente diferentes de las frecuencias de las funciones de onda para el potencial.

22. (a) Para una partícula en una caja demuestre que la diferencia fraccionaria en la energía entre los valores adyacentes es

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n + 1}{n^2}$$

(b) Utilice esta fórmula para analizar el límite clásico del sistema.

23. Aplicar la condición de normalización para demostrar que el valor de la constante multiplicativa para la eigenfunción $n = 3$ del pozo de potencial cuadrado infinito (6-79), es $B_3 = \sqrt{2/a}$.

24. Utilice la eigenfunción del problema 23 para calcular los siguientes valores de expectación y comentar cada uno de los resultados: (a) $\bar{x}$, (b) $\overline{p}$, (c) $\overline{x^2}$, (d) $\overline{p^2}$.

25. (a) Use el resultado del problema 24 para evaluar el producto de la incertidumbre en posición por la incertidumbre en el impulso para una partícula en el estado $n = 3$ de un pozo de potencial cuadrado infinito. (b) Compare con el resultado del ejemplo 5-10 y el problema 13 del capítulo 5 y comente sobre el tamaño relativo de los productos de incertidumbre para los estados $n = 1, n = 2$, y $n = 3$.

26. Forme el producto de las eigenfunciones para el estado $n = 1$ de un potencial de pozo cuadrado infinito con la eigenfunción para el estado $n = 3$ del mismo potencial, integre sobre toda x y demuestre que el resultado es igual a cero. En otras palabras, demuestre que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)\psi_3(x)\,dx = 0$$

(Sugerencia: use la relación $\cos u \cos v = [\cos(u + v) + \cos(u - v)]/2$). Los estudiantes que hayan resuelto el problema 33 del capítulo 5 ya han demostrado que la integral sobre todas las x de la eigenfunción $n = 1$ por la eigenfunción $n = 2$ también es igual a cero. Se puede demostrar que la integral sobre todas las x de dos eigenfunciones diferentes es igual a cero. Además, esto es cierto para cualesquiera dos eigenfunciones diferentes de cualquier otro potencial. (Si las eigenfunciones son complejas en el integrando se toma el complejo conjugado de una). A esta propiedad se le llama *ortogonalidad.*

27. Aplicar el resultado del problema 20 del capítulo 5 al caso de una partícula en una caja tridimensional. Esto es, resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula que se mueve en un potencial tridimensional que es cero en el interior de una región cúbica del lado a y que se hace infinitamente grande fuera de esta región. Determinar los eigenvalores y las eigenfunciones para el sistema.

28. Los pasajeros de un avión observan con frecuencia que las alas de sus aeroplanos oscilan hacia arriba y hacia abajo con períodos del orden de 1 seg y amplitudes de aproximadamente 0.1. m. (a) Demostrar que esto en definitiva no se debe al movimiento del punto cero de las alas, comparando la energía del punto cero con la energía que se obtiene de los valores citados más una masa estimada para las alas. (b) Calcular el orden de magnitud del número cuántico n de las oscilaciones observadas.

29. La constante C de la fuerza de restitución para las vibraciones del espaciamiento interatómico de una molécula diatómica típica es aproximadamente 10^3joules/m^2. Utilice este valor para estimar la energía del punto cero de las vibraciones moleculares.

30. (a) Estimar la diferencia en energía entre el estado base y el primer estado excitado de la molécula vibrante que se consideró en el problema 29. (b) A partir de esta estimación determine la energía del fotón emitido por las vibraciones en la distribución de carga cuando el sistema realiza una transición entre el primer estado excitado y el estado base. (c) Determine también la frecuencia del fotón y compárela con la frecuencia de oscilación clásica del sistema. (d) ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentra?

31. Un péndulo que consiste de un peso de 1 kg en el extremo de una barra ligera de 1 m, oscila con una amplitud de 0.1 m. Evaluar las cantidades siguientes: (a) frecuencia de oscilación, (b) energía de oscilación, (c) valor aproximado del número cuántico por oscilación, (d) separación de energía entre energías permitidas adyacentes, (e) separación en distancia entre dos protuberancias adyacentes en las cercanías del punto de equilibrio de la función densidad de probabilidad.

32. Esboce un argumento simple para verificar que el exponente en la exponencial decreciente que gobierna el comportamiento de las eigenfunciones del oscilador armónico simple en la región clásicamente excluida es proporcional a x^2. (Sugerencia: tome las eigenfunciones del pozo cuadrado finito de (6-63) y (6-64) y trate la cantidad $(V_0 - E)$ como si creciera al crecer x proporcionalmente a x^2).

33. Verificar la eigenfunción y el eigenvalor para el estado $n=2$ de un oscilador armónico simple por substitución directa en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, como en el ejemplo 6-7.

34. Determinar las formas de las cinco primeras eigenfunciones del oscilador armónico simple evaluando los coeficientes de los polinomios a partir de las relaciones de recurrencia desarrolladas en el apéndice H.

35. Desarrolle, tanto como sea posible, un intento de hacer una solución directa por series para (H-7) del apéndice H. Explicar claramente por qué fallan los intentos.

7

Atomos con un electrón

7.1 Introducción 279

La importancia del átomo con un electrón; masa reducida

7.2 Desarrollo de la ecuación de Schrödinger 280

Ecuación de Schrödinger tridimensional; ecuación independiente del tiempo

7.3 Separación de la ecuación independiente del tiempo 282

Coordenadas polares esféricas; ecuaciones en r, θ, y φ

7.4 Solución de las ecuaciones 284

Solución de la ecuación en φ ; unicidad y número cuántico m_l; procedimiento para la solución de la ecuación en θ y el número cuántico l; procedimiento para la solución de la ecuación en r y el número cuántico n.

7.5 Eigenvalores, números cuánticos y degeneración 286

Eigenvalores; comparación con otros potenciales ligantes; condiciones que satisfacen los números cuánticos; degeneración de las eigenfunciones; comparación con la degeneración clásica.

7.6 Eigenfunciones 289

Comparación entre los tratamientos de Bohr y de Schrödinger; verificación para una eigenfunción y un eigenvalor típicos.

7.7 Densidades de probabilidad 292

Densidad de probabilidad radial; capas; comparación con el átomo de Bohr; argumento del principio de incertidumbre para el radio del estado base; dependencia con l de la densidad de probabilidad cerca del núcleo; dependencia angular de la densidad de probabilidad; superficies nodales; significado del eje z; interpretación de la dependencia angular en términos del impulso angular orbital.

7.8 Impulso angular orbital **303**

Su papel en física cuántica; definición clásica; operadores asociados; valores de expectación y magnitud de la componente z; descripción geométrica de su comportamiento.

7.9 Ecuaciones de eigenvalores **308**

Valores de expectación de una cantidad fluctuante; ausencia de fluctuaciones en la magnitud y componente z del impulso angular orbital; ecuación general de eigenvalores; operador hamiltoniano

Preguntas **311**

Problemas **312**

7

Atomos con un electrón

7.1 Introducción

En este capítulo se empieza el estudio mecánico-cuántico de los átomos, tratando el caso más simple: *el átomo con un solo electrón.* Además, este es el caso más importante; en virtud de que por ejemplo, el átomo de hidrógeno, con un solo electrón, desde el punto de vista histórico por haber sido el primer sistema al que Schrödinger aplicó su teoría de la mecánica cuántica. Se verá que los eigenvalores que esta teoría predice para el átomo de hidrógeno concuerdan con los predichos por el modelo de Bohr y con los observados experimentalmente. Esto constituyó la primera verificación de la teoría de Schrödinger.

La teoría de Schrödinger sobre el átomo con un electrón es algo más que la predicción de los eigenvalores ya que también predice las eigenfunciones. A partir de estas eigenfunciones se estudiarán las siguientes propiedades atómicas: (1) las funciones de densidad de probabilidad, que proporcionan una descripción detallada de la estructura del átomo sin violar el principio de incertidumbre,como lo hacían las bien definidas órbitas del modelo de Bohr; (2) los impulsos angulares orbitales del átomo, que no fueron predichos con exactitud por el modelo de Bohr; (3) el spin electrónico y otros efectos relativistas que no fueron predichos correctamente por el modelo de Bohr, (4) la rapidez con la que el átomo pasa de sus estados excitados a su estado base, cantidades mensurables que no es posible predecir con el modelo de Bohr.

Además, y por encima de su importancia intrínseca e histórica, la teoría de Schrödinger del átomo con un electrón es de gran importancia práctica ya que constituye la base del tratamiento mecánico-cuántico de todos los átomos multielectrónicos, así como también de moléculas y núcleos. En los capítulos siguientes, esto se hará más evidente.

El átomo con un electrón es el sistema ligado más simple que hay en la naturaleza. Sin embargo, es más complicado que los sistemas tratados en los capítulos anteriores porque contiene *dos partículas* y porque es *tridimensional.* El sistema se compone de un núcleo cargado positivamente y un electrón cargado negativamente que se mueve bajo la influencia de su mutua atracción de Coulomb que, a la vez, los mantiene unidos. El carácter tridimensional del sistema le permite tener un impulso angular. Como consecuencia de lo anterior, se verá que aparecen fenómenos mecánico-cuánticos nuevos e interesantes. Dichos fenómenos, que implican el impulso angular, no podían estudiarse antes puesto que sólo se trataron sistemas unidimensionales.

El carácter tridimensional del átomo crea dificultades, ya que complica los procedimientos matemáticos que deben usarse en su tratamiento. Sin embargo, se siguen los mismos procedimientos a los utilizados para tratar sistemas unidimensionales, pero ampliados, de modo que no deberán surgir problemas conceptuales. Se evitarán los problemas prácticos omitiendo soluciones detalladas a las ecuaciones más difíciles; otros detalles de interés para algunos, pero

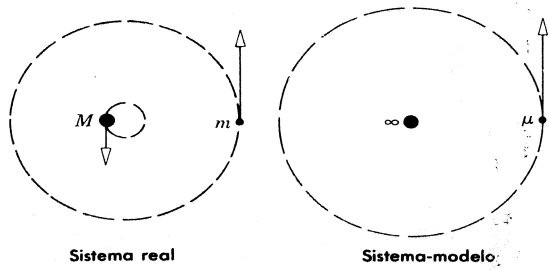


FIGURA 7-1

Izquierda: En un átomo con un electrón real, un electrón de masa m y el núcleo de masa M se mueven en torno a su centro de masas fijo. *Derecha:* En el átomo modelo equivalente, una partícula con masa reducida μ se mueve en torno a un núcleo estacionario de masa infinita.

no todos los estudiantes, se reservarán para los apéndices. Se presentarán los cálculos matemáticos suficientes para mostrar la forma en que este capítulo se relaciona con los anteriores, sin embargo, se hará énfasis en la importancia de las consideraciones físicas que están implícitas en las fórmulas, los resultados que se obtienen y la interpretación de los mismos.

El hecho de que el átomo con un electrón contiene dos partículas, de ninguna manera crea dificultades si se utiliza la técnica de la masa reducida. Esta técnica estudiada en la sección 4-7, consiste en representar el átomo real con un modelo en que el núcleo tiene masa infinita y el electrón tiene una *masa μ reducida* dada por:

$$\mu = \left(\frac{M}{m + M}\right) m \tag{7-1}$$

donde m es la masa verdadera del electrón y M es la masa verdadera del núcleo de masa infinita a la misma distancia del núcleo, que en el átomo real. En este átomo-modelo, el núcleo tiene una masa infinita y deberá estar completamente estacionario, de modo que será necesario tratar *únicamente* el movimiento del electrón con masa reducida; por lo tanto, el problema se simplifica puesto que, en vez de considerar dos partículas en movimiento, solo una se toma en cuenta.

Al aplicar la mecánica clásica se encontrará que el movimiento del electrón con masa reducida en torno al núcleo estacionario en este átomo-modelo, describe exactamente el movimiento del electrón respecto al núcleo en el átomo real. Además, se observará que la energía total del átomo-modelo será únicamente la que tenga el electrón de masa reducida y será igual a la energía total del átomo real, considerando un sistema de referencia en que el centro de masas esté en reposo. Posiblemente, el estudiante ya conoce la prueba de estos resultados de mecánica clásica, en relación con el movimiento de un planeta respecto al Sol, o cualquier otro sistema que implique el movimiento de dos partículas. No es difícil demostrar que se pueden obtener los mismos resultados utilizando mecánica cuántica, pero no se hará aquí. La figura 7-1, muestra el comportamiento del electrón y del núcleo en el átomo real y en el átomo-modelo. En ambos casos, el centro de masas está en reposo.

7.2 Desarrollo de la ecuación de Schrödinger

Por tanto, considérese un electrón de masa reducida μ que se mueve bajo la influencia del *potencial de Coulomb*:

$$V = V(x,y,z) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \tag{7-2}$$

onde x, y, z, son las coordenadas rectangulares del electrón de carga $-e$ respecto al núcleo que stá fijo en el origen. La raíz cuadrada en el denominador es justamente la distancia de separación r entre el núcleo y el electrón. La carga nuclear es $+Ze$ ($Z = 1$ para hidrógeno neutro, $Z = 2$ ara helio ionizado, etc.).

Como primer paso se desarrollará la ecuación de Schrodinger para este sistema tridiensional. Se procederá de acuerdo con el método indicado en la sección 5-4. Primero se escribe expresión clásica para la energía total E del sistema.

$$\frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x,y,z) = E \tag{7-3}$$

as cantidades p_x, p_y, p_z, son las componentes x, y, z, del impulso lineal del electrón. Por lo anto, el primer término de la izquierda corresponde a la energía cinética del sistema, mientras ue el segundo término es la energía potencial. Enseguida se sustituye las *cantidades dinámicas* p_x, p_y, p_z, y E por sus *operadores diferenciales* asociados, haciendo una extensión obvia a tres limensiones del caso presentado en (5-32). Se obtiene entonces la *ecuación de operadores*:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{7-4}$$

Operando con cada término sobre la *función de onda*

$$\Psi = \Psi(x,y,z,t) \tag{7-5}$$

Se obtiene la *ecuación de Schrödinger* para el sistema:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2\Psi(x,y,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z,t)}{\partial z^2}\right] + V(x,y,z)\Psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t} \tag{7-6}$$

Frecuentemente resulta más conveniente escribir lo anterior en la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{7-7}$$

donde se utiliza el símbolo

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{7-8}$$

llamado *Operador Laplaciano* o "del elevado al cuadrado" en coordenadas rectangulares.

Muchas de las propiedades de la ecuación de Schrödinger tridimensional y de las funciones de onda que son sus soluciones, se obtienen de extensiones inmediatas de las propiedades estudiadas en capítulos anteriores. Así por ejemplo, por la técnica de separación de variables, utilizada en la sección 5-5, es fácil demostrar que como el potencial $V(x,y,z)$ no depende del tiempo, existen soluciones a la ecuación de Schrödinger que tienen la forma:

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar} \tag{7-9}$$

donde la eigenfunción $\psi(x,y,z)$ es una solución de la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \tag{7-10}$$

Nótese que en tres dimensiones, ésta es una ecuación diferencial *parcial* ya que contiene tres variables independientes, las coordenadas espaciales x, y, z.

7.3 Separación de la ecuación independiente del tiempo

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial de Coulomb se puede resolver haciendo aplicaciones sucesivas de la técnica de separación de variables que permitan dividir la ecuación diferencial parcial en un conjunto de tres ecuaciones diferenciales ordinarias, cada una de ellas función de una sola coordenada, y después estas ecuaciones pueden resolverse utilizando los procedimientos ordinarios. Sin embargo, el método de separación de variables, *no* se puede utilizar cuando se emplean *coordenadas cartesianas* ya que la energía potencial de Coulomb es una función $V(x,y,z)=-Ze^2/4\pi\epsilon_0\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ de estas tres coordenadas. La separación de variables no podrá ser utilizada cuando se trabaje con coordenadas rectangulares porque el potencial mismo no puede dividirse en términos tales que cada uno de ellos sea función de una sola de las coordenadas.

Esta dificultad se puede evitar si se emplean *coordenadas polares esféricas*. Estas son las coordenadas r, θ, φ, que se muestran en la fig. 7-2. La r corresponde a la longitud de la línea que une el electrón con el origen (el núcleo) mientras que θ y φ corresponden a los ángulos polar y azimutal que especifican la orientación de dicha línea. Ahora bien, como la distancia entre el electrón y el núcleo está dada sólo por r, en coordenadas polares esféricas el potencial de Coulomb se puede expresar como función de una coordenada $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, en la forma siguiente:

$$V = V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{7-11}$$

Debido a esta gran simplificación en la forma del potencial, la separación de variables es realizable en la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo, como se verá enseguida.

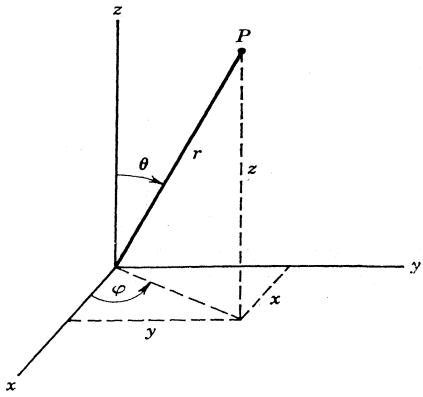


FIGURA 7-2

Las coordenadas esféricas r, θ, φ de un punto P y sus coordenadas cartesianas (rectangulares) x, y, z.

Las derivadas espaciales en la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo, también cambian de forma cuando se hace la transformación de coordenadas cartesianas a esféricas. Una aplicación directa pero tediosa de las reglas del cálculo diferencial demuestra que la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo se puede escribir como:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) + V(r)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{7-12}$$

donde:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \tag{7-13}$$

es el operador Laplaciano en coordenadas polares esféricas r, θ, φ. Para ver los detalles de la transformación de coordenadas que conducen a (7-12) y (7-13), el estudiante deberá consultar el apéndice 1. Comparando las formas del operador Laplaciano en coordenadas rectangulares y esféricas (7-8) y (7-13), se observa que se ha simplificado la expresión para la energía potencial a expensas de complicar considerablemente la expresión para el operador Laplaciano en la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo que se debe resolver.

De cualquier forma, el cambio de coordenadas vale la pena porque permitirá encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de la forma:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{7-14}$$

Es decir, se demostrará que existen soluciones $\psi(r,\theta,\varphi)$ de (7-12) que se dividen en productos de tres funciones, $R(r)$, $\Theta(\theta)$, y $\Phi(\varphi)$, cada una de las cuales sólo depende de una de las coordenadas. La ventaja se encuentra en el hecho de que estas tres funciones se pueden obtener resolviendo ecuaciones diferenciales *ordinarias*. Esto se demuestra sustituyendo el producto $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que se obtiene evaluando el operador Laplaciano en (7-12) a partir de (7-13). Se obtiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R\Theta\Phi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2 R\Theta\Phi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{\partial R\Theta\Phi}{\partial\theta}\right)\right] + V(r)R\Theta\Phi = ER\Theta\Phi$$

Realizando las derivadas parciales, se tendrá:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\Theta\Phi}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{R\Theta}{r^2\,\text{sen}^2\,\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \frac{R\Phi}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right] + V(r)R\Theta\Phi = ER\Theta\Phi$$

En esta ecuación la derivada parcial $\partial R/\partial r$ se escribió como la derivada total dR/dr ya que ambas son equivalentes debido a que R sólo es función de r. El mismo comentario puede aplicarse a las otras derivadas. Si ahora se multiplica toda la ecuación $-2\mu r^2\,\text{sen}^2\,\theta/R\Theta\Phi\hbar^2$ y vuelve a arreglar los términos se obtendrá:

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -\frac{\text{sen}^2\,\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{\text{sen}\,\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{2\mu}{\hbar^2}r^2\,\text{sen}^2\,\theta[E - V(r)]$$

Como el primer miembro de esta ecuación no depende ni de r ni de θ, mientras que el segundo miembro no depende de φ, su valor común no podrá depender de ninguna de estas variables.

Por lo tanto, el valor común deberá ser una constante, que por conveniencia se designará por $-m_l^2$. Así pues, igualando ambos miembros de la ecuación anterior a esta constante, se obtienen dos ecuaciones:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m_l^2\Phi \tag{7-15}$$

y

$$-\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{1}{\Theta \operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) - \frac{2\mu}{\hbar^2}r^2[E - V(r)] = -\frac{m_l^2}{\operatorname{sen}^2\theta}$$

Rearreglando términos, la segunda ecuación se puede escribir como:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E - V(r)] = \frac{m_l^2}{\operatorname{sen}^2\theta} - \frac{1}{\Theta \operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)$$

Como aquí se obtiene una ecuación cuyo primer miembro no depende de una de las variables y cuyo segundo miembro no depende de la otra, una vez más se puede concluir que ambos miembros son iguales a una constante. Por conveniencia se denota esta constante por $l(l + 1)$. De esta manera, igualando ambos miembros de la ecuación a $l(l + 1)$ se obtienen dos ecuaciones más:

$$-\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \frac{m_l^2\Theta}{\operatorname{sen}^2\theta} = l(l + 1)\Theta \tag{7-16}$$

y

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]R = l(l + 1)\frac{R}{r^2} \tag{7-17}$$

De esta manera, la supuesta solución en forma de producto $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$, es válida porque funciona. También se observa que el problema se ha reducido a resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias (7-15), (7-16), y (7-17), para $\Phi(\varphi)$, $\Theta(\theta)$, y $R(r)$.

Al resolver estas ecuaciones se encontrará que la ecuación tiene soluciones *aceptables* sólo para *ciertos valores de* m_l. Usando estos valores de m_l en la ecuación para $\Theta(\theta)$, resulta que esta ecuación tiene *soluciones* aceptables *para ciertos valores de* l. Con estos valores de l en la ecuación para $R(r)$, se encuentra que ésta sólo tiene soluciones *aceptables* para *ciertos valores de la energía total* E; es decir, la energía del átomo está cuantizada.

7.4 Solución de las ecuaciones

Considérese (7-15) para $\Phi(\varphi)$. El estudiante podrá verificar, por diferenciación y sustitución, que esa ecuación tiene la solución particular:

$$\Phi(\varphi) = e^{im_l\varphi}$$

(La razón para usar esta solución particular se explica a continuación del ejemplo 7-5). En este caso, por primera vez, se tiene que considerar explícitamente el requisito, expuesto en la sección 5-6, de que toda función de onda debe ser *monovaluada*. La condición de que $\Phi(\varphi)$ sea monovaluada se debe considerar explícitamente debido a que los ángulos azimutales $\varphi = 0$ y $\varphi = 2\pi$ en realidad son el mismo ángulo, es decir,

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi)$$

Evaluando la exponencial en la solución particular $\Phi(\varphi)$ se obtiene:

$$e^{im_l 0} = e^{im_l 2\pi}$$

o

$$1 = \cos m_l 2\pi + i \operatorname{sen} m_l 2\pi$$

Esta condición se satisface sólo si el valor absoluto de m_l toma uno de los valores

$$|m_l| = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{7-18}$$

En otras palabras, m_l sólo puede ser un número *entero*, positivo o negativo. Por lo tanto, el conjunto de ecuaciones que son soluciones *aceptables* de (7-15) son:

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{im_l\varphi} \tag{7-19}$$

donde m_l toma uno de los valores enteros especificados por (7-18). La forma específica de las soluciones aceptables, se identifica con el *número cuántico* m_l, usado como subíndice.

En cuanto a las funciones $\Theta(\theta)$, que son solución de (7-16), el procedimiento para obtenerlas es muy parecido al que se utiliza para resolver la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo. Con un potencial de oscilador armónico simple, los estudiantes interesados en esto, pueden ver la explicación de este procedimiento un tanto largo, en el apéndice H. Aquí sólo se citarán los resultados. Se encuentra que las soluciones *aceptables* (que permanecen finitas) de (7-16) sólo se obtienen si la constante l es igual a uno de los *enteros:*

$$l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \ldots \tag{7-20}$$

Las soluciones aceptables se pueden escribir como:

$$\Theta_{lm_l}(\theta) = \operatorname{sen}^{|m_l|}\theta\, F_{l|m_l|}(\cos\theta) \tag{7-21}$$

Las $F_{l|m_l|}(\cos\theta)$ son polinomios en $\cos\theta$, cuya forma depende del valor del *número cuántico* l y del valor absoluto del número cuántico m_l. Así, es necesario usar ambos números cuánticos para identificar las funciones $\Theta_{lm_l}(\theta)$ que resuelven satisfactoriamente la ecuación. En la sección 7-6 se presentarán ejemplos de estas funciones.

El procedimiento utilizado para obtener las funciones $R(r)$ que son soluciones de (7-17), es también muy similar al utilizado en el caso del potencial de oscilador armónico simple. Se encuentra que las soluciones correspondientes a estados ligados sólo son aceptables (permanecen finitas) si la constante E (la energía total) tiene uno de los valores E_n, donde

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \tag{7-22}$$

En esta expresión, el *número cuántico* n es uno de los enteros:

$$n = l + 1, l + 2, l + 3, \ldots \tag{7-23}$$

Las soluciones aceptables se pueden escribir en forma más conveniente como:

$$R_{nl}(r) = e^{-Zr/na_0}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^l G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) \tag{7-24}$$

donde el parámetro a_0 es:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \tag{7-25}$$

Los términos $G_{nl}(Zr/a_0)$ son polinomios en Zr/a_0, que toman diferentes formas para diferentes valores de n y l. Por lo tanto, ambos números cuánticos son necesarios para identificar las diferentes funciones $R_{nl}(r)$ que son soluciones aceptables de la ecuación. Sin embargo, los valores permitidos de E_n la energía total, son caracterizados sólo por el número cuántico n, ya que sólo dependen del valor que tome este número cuántico. En la sección 7-6, se presentarán ejemplos de las funciones $R_{nl}(r)$.

7.5 Eigenvalores, números cuánticos y degeneración

Uno de los resultados más importantes de la teoría de Schrödinger del átomo con un electrón, es la predicción de los valores permitidos de la energía total correspondiente a estados ligados del átomo, dados por (7-22). Comparando los eigenvalores predichos,

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

con las predicciones del modelo de Bohr (ver 4-18), se puede comprobar que ambos métodos conducen a valores *idénticos* de las energías permitidas. Además, la concordancia de ambas predicciones con la experimentación es excelente. La derivación de la ecuación (7-22) por Schrödinger constituyó la primera verificación convincente de su teoría de la mecánica cuántica. En la figura 7-3 se ilustra el potencial de Coulomb $V(r)$ para el átomo con un electrón y sus *eigenvalores* E_n.

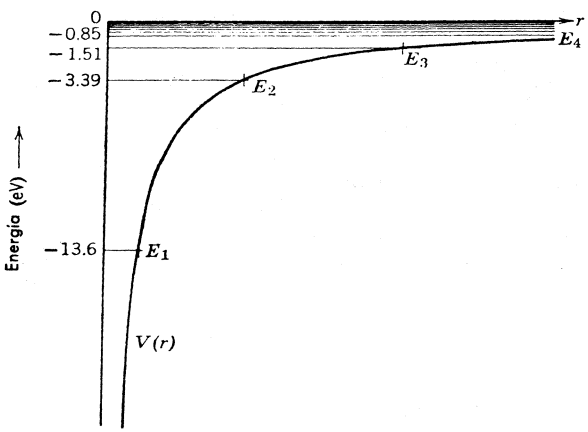


FIGURA 7-3

El potencial de Coulomb $V(r)$ y sus eigenvalores E. Para valores grandes de n, los eigenvalores tienen espaciamientos pequeños en energía, ya que E tiende a cero a medida que n tiende a infinito. Obsérvese que la intersección de $V(r)$ con E, que define la posición de un extremo de la región clásicamente permitida, se desplaza hacia fuera a medida que n aumenta. En la figura no se muestran el continuo de eigenvalores de energías positivas correspondientes a estados no ligados.

¿Cuál es la relación entre el potencial de Coulomb y sus eigenvalores con los potenciales estudiados en el capítulo 6 y sus eigenvalores? Una diferencia obvia entre estos dos casos, es que el cálculo mecánico-cuántico que conduce a los eigenvalores del potencial de Coulomb es notablemente más complicado. Sin embargo, el potencial de Coulomb es una descripción exacta de un sistema tridimensional real. Los potenciales previamente estudiados son descripciones aproximadas de sistemas ideales unidimensionales, construidos para simplificar los cálculos. Para el caso del potencial de Coulomb, las complicaciones se originan, en parte, debido a su simetría esférica, que obliga a usar coordenadas polares esféricas en lugar de coordenadas cartesianas.

Las semejanzas son mucho más fundamentales que las diferencias. Para el potencial de Coulomb, como para cualquier otro potencial ligante, las energías totales permitidas de una partícula ligada al potencial, están *discretamente cuantizadas*. En la figura 7-4 se hace una comparación entre las energías permitidas del potencial de Coulomb y las correspondientes a varios potenciales ligantes unidimensionales. En esta figura, el potencial de Coulomb está representado por un corte transversal a lo largo del diámetro de un átomo con un electrón. Nótese que todos los potenciales ligantes poseen una *energía de punto cero*; es decir, el nivel más bajo permitido de la energía total, siempre se encuentra por encima del mínimo correspondiente a la energía potencial. Asociado a esta energía de punto cero, el átomo con un electrón posee un movimiento de punto cero, de modo similar al de otros sistemas descritos por potenciales ligantes. En la siguiente sección se verá cómo estos fenómenos pueden proporcionar una explicación básica de la estabilidad del estado base del átomo.

A pesar de que los eigenvalores del átomo con un electrón sólo dependen del número cuántico n, las eigenfunciones dependen de los tres números cuánticos $n, l, y\ m_l$ ya que resultan del producto de las tres funciones $R_{nl}(r)$, $\Theta_{lm_l}(\theta)$, y $\Phi_{m_l}(\varphi)$. *El hecho de que aparezcan tres números cuánticos es una consecuencia de que la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo contiene tres variables independientes, una por cada coordenada espacial.* Resumiendo las condiciones que deben cumplir los números cuánticos, se tiene que:

$$\begin{aligned} |m_l| &= 0, 1, 2, 3, \ldots \\ l &= |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \ldots \\ n &= l + 1, l + 2, l + 3, \ldots \end{aligned} \tag{7-26}$$

Estas condiciones se pueden expresar en forma más conveniente como:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \ldots \\ l &= 0, 1, 2, \ldots, n - 1 \\ m_l &= -l, -l + 1, \ldots, 0, \ldots, +l - 1, l \end{aligned} \tag{7-27}$$

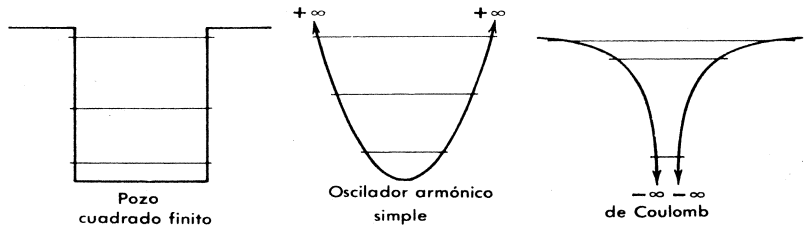


FIGURA 7-4

Comparación entre las energías permitidas de varios potenciales ligantes. El potencial de Coulomb tridimensional se muestra en un corte transversal a lo largo del diámetro; los otros potenciales son unidimensionales.

Ejemplo 7-1. Demuéstrese que las condiciones (7-27) son equivalentes a las de (7-26).

De acuerdo con (7-26), el valor mínimo de l es igual a $|m_l|$, y el valor mínimo de $|m_l|$ es cero. Por lo tanto, el valor mínimo que es igual a $l+1$, será $0+1 = 1$. Como n crece indefinidamente por múltiplos enteros, sus valores posibles son: $n = 1,2,3,....$ Dada una n, el valor máximo de l es el que satisface la relación $n = l+1$, es decir $l = n - 1$. Consecuentemente, los valores posibles de l son $l = 0, 1, 2, ..., n-1$. Finalmente, dada una l, el valor máximo de $|m_l|$ es $+l$ y el mínimo es $-l$ y sólo puede tomar los valores $m_l = -l, -l + 1, \ldots, 0, \ldots, +l - 1, +l$. ◀

Algunas veces a n se le llama número cuántico *principal*, por el papel que juega en la determinación de la energía total del átomo. Como el impulso angular orbital o azimutal del átomo, depende del número l, como pronto se verá, a l con frecuencia se le llama número cuántico *azimutal*. También se verá que si se coloca un átomo en un campo magnético externo, su energía dependerá de m_l. Consecuentemente, a m_l se le llama en ocasiones, número cuántico *magnético*.

Las condiciones (7-27) hacen evidente que para una n dada existen generalmente varios posibles valores diferentes para l y m_l. Como la forma de las eigenfunciones depende de los tres números cuánticos, evidentemente habrá situaciones en las que dos o más eigenfunciones diferentes correspondan exactamente al mismo eigenvalor E_n. Como las eigenfunciones describen el comportamiento del átomo, éste tendrá estados con un *comportamiento completamente diferente* pero que, a pesar de todo, tienen la *misma energía total*. En física, el término que se usa para caracterizar este fenómeno es *degeneración* y las eigenfunciones correspondientes al mismo eigenvalor se dice que son *degeneradas*. Existe una ligera relación con el uso común de esta palabra: "las eigenfunciones degeneradas no son por ello reprendibles".

La degeneración también ocurre en mecánica clásica y en la llamada mecánica cuántica antigua. En el análisis de las órbitas elípticas del átomo de Bohr-Sommerfeld, en la sección 4-10, se indicó que la energía total del átomo era independiente del tamaño del semi-eje menor de la elipse. De esta manera, el átomo tiene estados con comportamientos muy diferentes, es decir, con los electrones moviéndose en órbitas muy diferentes que de todas maneras tienen la misma energía total. En el movimiento planetario ocurre exactamente el mismo fenómeno. Esta degeneración clásica es comparable con la degeneración en l que ocurre en el tratamiento cuántico del átomo con un electrón. En el caso del átomo de Bohr-Sommerfeld o del movimiento planetario, la energía también resulta independiente de la orientación en el espacio del plano de la órbita. Esto es comparable con la degeneración del átomo cuántico en m_l.

Tanto en mecánica clásica como en la cuántica, la degeneración resulta de ciertas propiedades de la función de la energía potencial que describe el sistema. En el tratamiento cuántico del

TABLA 7-1 Valores posibles de l y m_l para n = 1,2,3

n	1	2		3		
l	0	0	1	0	1	2
m_l	0	0	−1, 0, +1	0	−1, 0, +1	−2, −1, 0, +1, +2
Número de eigenfunciones degeneradas para cada l	1	1	3	1	3	5
Número de eigenfunciones degeneradas para cada n	1	4		9		

átomo con un electrón, la degeneración respecto de m_l resulta de que la energía potencial es esféricamente simétrica y la energía total del átomo es independiente de su orientación en el espacio. La degeneración respecto a l es una consecuencia de la forma particular en la que el potencial de Coulomb depende de r.

Se aplica al átomo un campo magnético externo, entonces su energía total *dependerá* de su orientación en el espacio, debido a la interacción entre la corriente en el átomo y el campo aplicado. Más adelante se estudiará este efecto y se encontrará que la orientación en el espacio queda determinada por el número cuántico m_l. Así, en un campo magnético externo, la degeneración respecto a m_l se elimina y el átomo tendrá diferentes niveles de energía, correspondientes a diferentes valores de m_l

Si el campo magnético externo se reduce en intensidad gradualmente, la dependencia de la energía total del átomo con m_l, se reduce a cero, los niveles de energía correspondientes a diferentes valores de m_l se degeneran en un solo nivel y las eigenfunciones correspondientes se vuelven degeneradas.

Muchas propiedades atómicas de los átomos alcalinos se pueden analizar en términos del movimiento de un solo electrón "de valencia" en un potencial esféricamente simétrico, pero que no tiene la dependencia $1/r$ del potencial de Coulomb. La energía de este electrón *sí* depende de l. Por lo tanto, la degeneración respecto a l, se elimina si se altera la forma conforme el potencial depende de r. Más adelante en este libro, se estudiará este fenómeno en varias ocasiones, y en ese proceso se obtendrá una visión más clara del origen de la degeneración respecto a l del potencial de Coulomb.

Para un átomo monoelectrónico aislado resulta fácil encontrar mediante (7-27) cuántas eigenfunciones degeneradas existen correspondientes a un eigenvalor particular E_n. Los valores posibles de los números cuánticos para $n = 1$, 2 y 3, se muestran en la tabla 7-1. Por inspección de la tabla es evidente que:

1. Para cada valor de n, hay n valores posibles de l.
2. Para cada valor de l, hay $(2l + 1)$ valores posibles de m_l.
3. Para cada valor de n hay un total de n^2 eigenfunciones degeneradas.

7.6 Eigenfunciones

Las técnicas matemáticas empleadas en mecánica cuántica para obtener (7-22) para los eigenvalores del átomo con un electrón, son, desde luego, mucho más complicadas si se las compara con las usadas en el modelo de Bohr para obtener la misma ecuación. Haciendo a un lado cuestiones como la consistencia lógica de los postulados del modelo de Bohr, aún es razonable preguntarse si todo el trabajo extra que involucra el tratamiento cuántico del átomo con un electrón, se justifica por los resultados obtenidos. La respuesta es, contundentemente; sí. Ahora se puede saber mucho más acerca del átomo con un electrón de lo que es posible obtener del modelo de Bohr, ya que se tienen las eigenfunciones además de los eigenvalores. Las eigenfunciones poseen una gran cantidad de información adicional acerca de las propiedades del átomo. Lo que resta de este capítulo y el siguiente, serán dedicados en gran parte, al estudio de las eigenfunciones y a obtener de ellas esta información.

Se sabe que las eigenfunciones se forman tomando el producto,

$$\psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$$

También se sabe de (7-19), (7-21) y (7-23) que para cualquier estado ligado,

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{im_l\varphi}$$

$$\Theta_{lm_l}(\theta) = \text{sen}^{|m_l|}\theta\,(\text{polinomios en } \cos\theta)$$

y

$$R_{nl}(r) = e^{-\text{(constante) } r/n} r^l \text{(polinomios en } r)$$

Todas las eigenfunciones tienen básicamente la misma estructura matemática, excepto que con valores crecientes de n y l los polinomios en r y $\cos\theta$ se vuelven cada vez más complicados. En la tabla 7-2 se muestra una lista de las eigenfunciones del átomo con un electrón para los primeros tres valores de n. Están expresadas en términos del parámetro:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \times 10^{-10}\ \text{m} = 0.529\ \text{Å}$$

que el estudiante podrá reconocer como el radio de la órbita más pequeña de un átomo de hidrógeno de Bohr. La constante multiplicativa en cada eigenfunción ha sido ajustada de manera que esté normalizada. En otras palabras, la integral sobre todo el espacio de la densidad de probabilidad correspondiente es igual a uno, de manera que en cada estado cuántico existe probabilidad igual a uno de encontrar al electrón atómico en algún lugar.

Ejemplo 7-2. Verificar que las eigenfunciones ψ_{211}, y los eigenvalores asociados E_2, satisfacen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, (7-12), para el átomo con un electrón con $Z = 1$.

TABLA 7-2 Algunas eigenfunciones para el átomo con un electrón

Números cuánticos n	l	m_l	Eigenfunciones
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}\cos\theta$
2	1	±1	$\psi_{21\pm1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}\operatorname{sen}\theta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0}\cos\theta$
3	1	±1	$\psi_{31\pm1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0}\operatorname{sen}\theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0}(3\cos^2\theta - 1)$
3	2	±1	$\psi_{32\pm1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0}\operatorname{sen}\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	±2	$\psi_{32\pm2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0}\operatorname{sen}^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$

Como la ecuación diferencial es lineal en ψ, en lo que toca a esta verificación se puede ignorar la constante multiplicativa $1/8\pi^{1/2}a_0^{5/2}$, y escribir la eigenfunción como:

$$\psi = re^{-r/2a_0}\,\mathrm{sen}\,\theta e^{i\varphi}$$

Este es el caso más simple con dependencia no trivial en las tres coordenadas. De cualquier manera, la verificación de este caso deberá dar al estudiante confianza en la validez de todas las eigenfunciones citadas en la tabla 7-2.

Antes de empezar, se introduce por conveniencia la notación

$$\psi = f(r,\varphi)\,\mathrm{sen}\,\theta = f\,\mathrm{sen}\,\theta$$

y

$$\psi = g(\theta,\varphi)\,re^{-r/2a_0} = gre^{-r/2a_0}$$

Esta notación será útil en la evaluación de las derivadas que aparecen en (7-12, que es;

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\mathrm{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)\right] + V\psi = E\psi$$

Primero se calcula:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = \frac{\partial}{\partial\theta}(f\,\mathrm{sen}\,\theta) = f\cos\theta$$

$$\mathrm{sen}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = f\,\mathrm{sen}\,\theta\cos\theta$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) = f(\cos^2\theta - \mathrm{sen}^2\,\theta)$$

$$\frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) = \frac{f}{r^2}\left(\frac{\cos^2\theta - \mathrm{sen}^2\,\theta}{\mathrm{sen}\,\theta}\right)$$

Enseguida se calcula:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = (i)^2\psi = -\psi = -f\,\mathrm{sen}\,\theta$$

$$\frac{1}{r^2\mathrm{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = -\frac{f}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}$$

Sumando estos dos resultados, se obtiene:

$$\frac{1}{r^2\mathrm{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)$$
$$= \frac{f}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta}(\cos^2\theta - \mathrm{sen}^2\,\theta - 1) = -\frac{2f\mathrm{sen}^2\,\theta}{r^2\,\mathrm{sen}\,\theta} = -\frac{2f\,\mathrm{sen}\,\theta}{r^2} = -\frac{2\psi}{r^2}$$

Después se calcula:

$$\frac{\sigma\psi}{\partial r} = g\left(e^{-r/2a_0} - \frac{r}{2a_0}e^{-r/2a_0}\right)$$

$$r^2\frac{\partial\psi}{\partial r} = g\left(r^2e^{-r/2a_0} - \frac{r^3}{2a_0}e^{-r/2a_0}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) = g\left(2re^{-r/2a_0} - \frac{r^2}{2a_0}e^{-r/2a_0} - \frac{3r^2}{2a_0}e^{-r/2a_0} + \frac{r^3}{4a_0^2}e^{-r/2a_0}\right)$$

$$= 2gre^{-r/2a_0}\left(1 - \frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{8a_0^2}\right) = 2\left(1 - \frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{8a_0^2}\right)\psi$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) = 2\left(\frac{1}{r^2} - \frac{1}{ra_0} + \frac{1}{8a_0^2}\right)\psi$$

Sustituyendo este término y el que proviene de las derivadas respecto θ y φ, en la ecuación diferencial que se supone debe satisfacer, se obtiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[2\left(\frac{1}{r^2}-\frac{1}{ra_0}+\frac{1}{8a_0^2}\right)-\frac{2}{r^2}\right]\psi + V\psi = E\psi$$

o

$$\frac{\hbar^2}{\mu a_0}\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{8a_0}\right)+V=E$$

Ahora bien,

$$E = E_2 = -\frac{\mu e^4}{8(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}.$$

Asimismo,

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

y

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

De manera que se tiene:

$$\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\left(\frac{1}{r}-\frac{\mu e^2}{8(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\mu e^4}{8(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}$$

Como por inspección se puede demostrar que esta ecuación se satisface idénticamente, se completa la verificación. ◀

7.7 Densidad de probabilidad

El estudio de la información que se puede obtener de las eigenfunciones del átomo con un electrón, se inicia analizando la forma de las *funciones de densidad de probabilidad* correspondientes:

$$\Psi^*\Psi = \psi^*_{nlm_l}e^{iE_nt/\hbar}\psi_{nlm_l}e^{-iE_nt/\hbar} = \psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l} = R^*_{nl}\Theta^*_{lm_l}\Phi^*_{m_l}R_{nl}\Theta_{lm_l}\Phi_{m_l}$$

Todas estas son funciones de tres coordenadas y no se pueden graficar directamente en dos dimensiones. Sin embargo, se puede estudiar su comportamiento tridimensional considerando separadamente su dependencia con cada coordenada. Primero se considerará la dependencia en r en términos de la *densidad de probabilidad radial* $P(r)$, definida de modo que $P(r)dr$ es la probabilidad de encontrar al electrón en cualquier posición con coordenada radial entre r y $r+dr$. Integrando la densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$, la cual es una probabilidad por unidad de volumen, en el volumen limitado por dos esferas de radios r y $r+dr$, se demuestra fácilmente que:

$$P_{nl}(r)\,dr = R^*_{nl}(r)R_{nl}(r)r^2\,dr \tag{7-28}$$

En el primer miembro aparece r^2 porque el volumen entre las esferas es proporcional a ese factor. Obviamente, resulta apropiado especificar las funciones de densidad de probabilidad radial en términos de los números cuánticos n y l, pero la forma de estas funciones no depende del número cuántico m_l. En la figura 7-5 se grafican varias $P_{nl}(r)$, empleando cantidades adimensionales para cada eje.

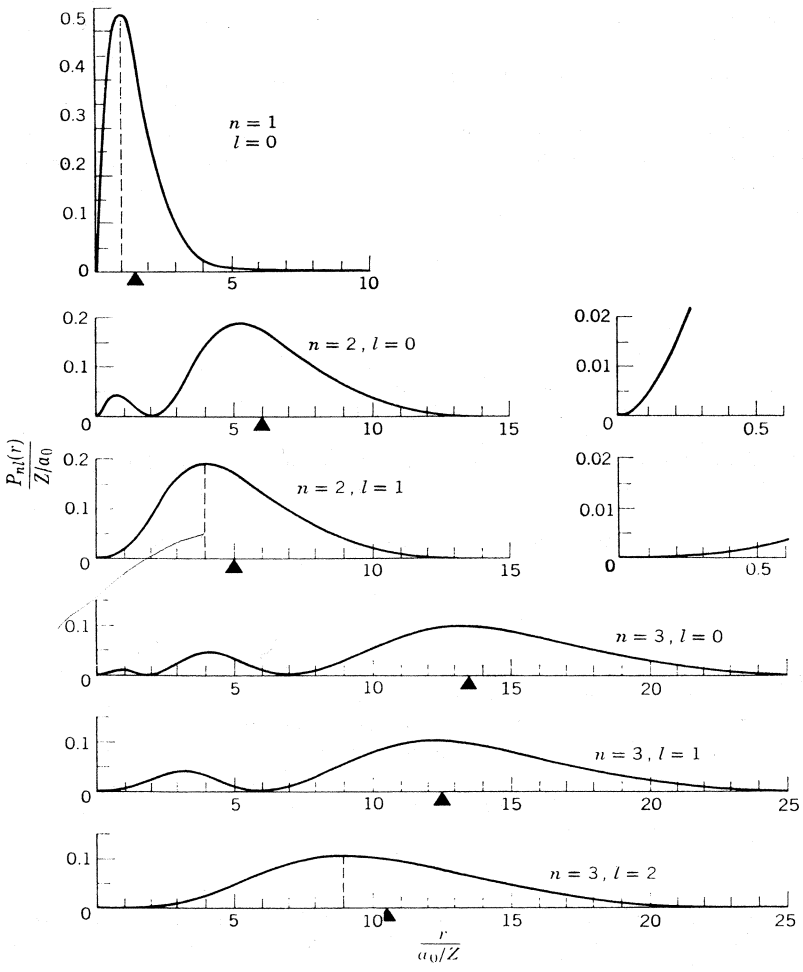


FIGURA 7-5

Se muestra la densidad de probabilidad radial para el electrón en un átomo con un electrón, para $n = 1,2,3$, y los valores de l que se muestran. Los triángulos en cada abscisa indican los valores de r_{nl} dados por (7-31). Para $n=2$ las gráficas se volvieron a dibujar con las escalas de la abscisa y ordenada aumentadas en un factor de diez para mostrar el comportamiento de $P_{nl}(r)$ cerca del origen. Nótese que en los casos para los cuales $l = l_{\max} = n-1$, el máximo de $P_{nl}(r)$ ocurre para $r_{\text{Bohr}} = n^2 a_0/Z$, lo cual se indica por la posición de la línea punteada.

Un análisis de la figura nos muestra que las densidades de probabilidad radial, para cada conjunto pertinente de números cuánticos, tienen valores apreciables en intervalos razonablemente restringidos de la coordenada radial. Por lo tanto, cuando el átomo se encuentra en uno de sus estados cuánticos, especificado por un conjunto particular de números cuánticos, existe una alta probabilidad de que la coordenada radial del electrón se encuentre dentro de un intervalo razonablemente restringido. Probablemente, el electrón se encuentre dentro de cierto

cascarón comprendido entre dos esferas concéntricas con el núcleo. Un estudio de la figura demostrará que los radios característicos de estos cascarones están determinados, en primer lugar, por el número cuántico n, aunque también se tiene una pequeña dependencia en l.

Esta propiedad puede verse en forma más cuantitativa haciendo uso del valor de expectación de la coordenada radial del electrón para caracterizar el radio del cascarón. Haciendo una extensión obvia a tres dimensiones de los argumentos de la sección 5-4, se demuestra que el valor de expectación estará dado por la expresión:

$$\overline{r_{nl}} = \int_0^\infty r P_{nl}(r)\, dr$$

Evaluando la integral, se obtiene

$$\overline{r_{nl}} = \frac{n^2 a_0}{Z}\left\{1 + \frac{1}{2}\left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right]\right\} \tag{7-29}$$

En la figura 7-5, los valores de $\overline{r_{nl}}$ se indican con pequeños triángulos. Evidentemente $\overline{r_{nl}}$ depende esencialmente de n, ya que la dependencia en l se suprime por los factores $1/2$ y $1/n^2$ en (7-29).

Se puede hacer una comparación interesante entre (7-29) y (4-16)

$$r_{\text{Bohr}} = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

lo cual proporciona las órbitas circulares del átomo de Bohr. La mecánica cuántica demuestra que los radios de estas capas son aproximadamente del mismo tamaño que los radios de las órbitas circulares de Bohr. Estos radios aumentan rápidamente con n. La razón básica es que la energía total del átomo, E_n se vuelve más positiva conforme n aumenta, de manera que aquella región de la coordenada r, para la cual E_n es mayor que $V(r)$, se expande a medida que n crece, como se puede ver la figura 7-3. Esto es, las capas se expanden a medida que n crece, porque las regiones clásicamente permitidas se expanden.

Ejemplo 7-3. (a) Calcular la posición en la cual la densidad de probabilidad radial es un máximo para el estado base del hidrógeno. (b) A continuación, calcular el valor de expectación para la coordenada radial correspondiente a este estado. (c) Interprete estos resultados en términos de los que se obtienen de medidas de la posición del electrón en el átomo.

(a) La densidad de probabilidad radial para el estado base, $n=1$, $l=0$ es

$$P_{10}'(r) = R_{10}^*(r) R_{10}(r) r^2$$

$R_{10}(r)$ se toma del primer factor dependiente de r de la primera eigenfunción que figura en la tabla 7-2 con $Z = 1$, y se obtiene

$$P_{10}(r) = e^{-r/a_0}\, e^{-r/a_0}\, r^2 = e^{-2r/a_0}\, r^2$$

Se ha ignorado la normalización (es decir por simplicidad, la constante multiplicativa se toma igual a uno) ya que no tiene ningún efecto en lo que se hará aquí. Esto es, encontrar el máximo en $P_{10}(r)$, evaluando su derivada respecto a r e igualando el resultado a cero. Es decir

$$\frac{dP_{10}(r)}{dr} = -\frac{2}{a_0} e^{-2r/a_0} r^2 + e^{-2r/a_0} 2r$$
$$= \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-2r/a_0} 2r = 0$$

La solución de la ecuación que se ha obtenido es

$$1 - \frac{r}{a_0} = 0$$

o

$$r = a_0$$

Esta es la posición del máximo en la densidad de probabilidad radial.

(b) Para calcular el valor esperado de la coordenada radial r, se evalúa (7-29) con $n=1$, $l=0$ y $Z=1$. Se obtiene,

$$\overline{r_{10}} = a_0\{1 + (\tfrac{1}{2})\,[1]\} = 1.5a_0$$

(c) El valor de expectación de r encontrado, es algo mayor que el de r para el cual la densidad de probabilidad radial es máximo. La razón es que la densidad de probabilidad radial es asimétrica respecto a su máximo, de modo que existe una probabilidad pequeña, pero no despreciable, de encontrar valores grandes de r en medidas de la posición del electrón en el átomo. De esta manera, aunque la posición más probable del electrón es en $r = a_0$ (es decir, en el radio de la órbita de Bohr correspondiente al estado base), el valor promedio que se obtiene en medidas de la posición es $\bar{r} = 1.5a_0$. Todas estas características se pueden apreciar examinando la curva superior en la figura 7-5. ◀

Ejemplo 7-4. El tamaño del átomo de hidrógeno, en su estado base, se puede tomar como el radio de la capa correspondiente a $n=1$ para $Z=1$, el cual es esencialmente $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/\mu e^2 \simeq 0.5$ Å. Demostrar que estas unidades atómicas fundamentales se pueden obtener del principio de incertidumbre.

La forma de la función potencial

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

tiende a ocasionar un colapso del átomo, ya que a medida que la distancia entre el electrón y el núcleo se hace más pequeña, la energía potencial se hace más negativa. Esta tendencia es contrarrestada por el principio de incertidumbre de la manera siguiente; si el electrón se mantiene dentro de una región de tamaño R, entonces, cualquier componente de su impulso lineal deberá tener una incertidumbre de aproximadamente

$$\Delta p = \frac{\hbar}{R}$$

Esta incertidumbre refleja el hecho de que el impulso lineal de magnitud p puede estar en cualquier dirección, de manera que sus componentes pueden tener valores entre $-p$ y $+p$. Por lo tanto, la incertidumbre en cualquier componente del impulso lineal, también satisface aproximadamente la relación

$$\Delta p = p$$

Por lo tanto, el electrón deberá tener una energía cinética aproximadamente igual a

$$K = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{(\Delta p)^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}$$

Aquí puede verse que la energía cinética se vuelve más positiva conforme disminuye R, lo cual se opone al efecto de colapso que produce la energía potencial.

Si el tamaño del átomo es R, su energía potencial es aproximadamente

$$V = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

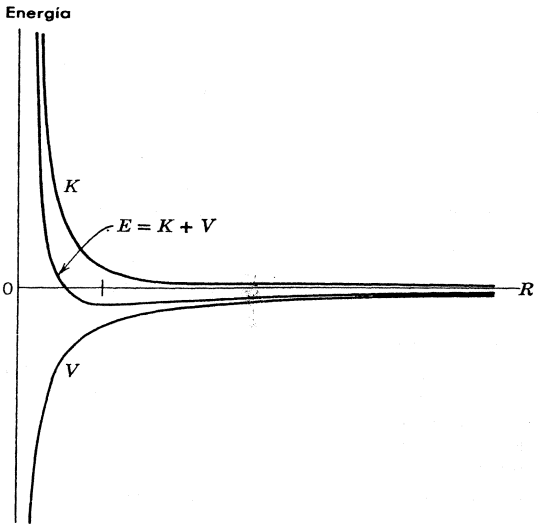


FIGURA 7-6

Comportamiento cualitativo de la energía cinética K, energía potencial V y energía total E del átomo de hidrógeno, como función del tamaño R del átomo. Para R pequeña, K aumenta más rápidamente de lo que V decrece ya que $K \propto 1/R^2$ mientras que $V \propto -1/R$. Para valores grandes de R, la K se vuelve despreciable comparada con V. En consecuencia, E tiene un mínimo a cierto valor de R (indicado por la marca sobre el eje de las R's), y para este tamaño el átomo es más estable.

La energía total del átomo es, aproximadamente:

$$E = K + V = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

El átomo ajustará su tamaño de manera tal que minimice su energía total, sujetándose a la tendencia general de todos los sistemas físicos de ser lo más estables posible. Examinando cualitativamente la figura 7-6, en donde se grafican K, V y E como funciones de R, se puede ver la existencia de un tamaño óptimo. (Nótese que R *no* es la coordenada radial; es el tamaño del átomo que aquí se trata como variable, con el fin de determinar su valor óptimo). El tamaño más energéticamente favorable, se puede encontrar cuantitativamente diferenciando E respecto de R e igualando la derivada a cero. Esto es:

$$\frac{dE}{dR} = -\frac{2\hbar^2}{2\mu R^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} = 0$$

Resolviendo la ecuación para R, se encuentra

$$R = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = a_0$$

la cual proporciona el tamaño con mínima energía total, y por lo tanto, el átomo más estable.

El principio de incertidumbre determina el tamaño mínimo del átomo porque determina su energía mínima. Esta es la energía del punto cero del estado base, cuya magnitud proviene de su movimiento del punto cero. Estas ideas simples proporcionan una respuesta muy satisfactoria respecto a la cuestión de la estabilidad del estado base del átomo. Esto es particularmente cierto si se considera el análisis que sigue al ejemplo 5-13, en el que se demuestra que el átomo, en su estado base, no emite radiaciones. ◀

En la figura 7-5 se muestra que los *detalles* de la estructura de las funciones de densidad de probabilidad radial, dependen del valor del número cuántico l. Para una n dada, la función tiene un solo máximo intenso, cuando l toma su valor más grande posible; sin embargo, se desarrollan máximos más débiles, dentro del más intenso, cuando l toma valores más pequeños. Por lo general, estos máximos débiles, no son tan importantes. De cualquier forma, existe una propiedad, relacionada con ésto, que puede ser muy importante. Examinando la figura,

especialmente las gráficas amplificadas correspondientes a $n=2$. $l=0$ y $n=2$ $l=1$, se demuestra que las funciones de densidad de probabilidad radial tienen valores apreciables cerca del origen, en $r=0$. y sólo cuando $l=0$. Esto quiere decir que sólo para $l=0$, existe una probabilidad apreciable de encontrar al electrón cerca del núcleo.

Otra forma de ver esta misma propiedad, es considerando la densidad de probabilidad, $\Psi^*\Psi = \psi^*\psi$. Examinando las eigenfunciones que se muestran en la tabla 7-2, se encuentra que para valores pequeños de r comparados con a_0/Z, cuando el término exponencial varía lentamente, la dependencia radial de todas las eigenfunciones se comporta como

$$\psi \propto r^l \qquad r \to 0 \quad (7\text{-}30)$$

Este comportamiento puede verificarse fácilmente por sustitución directa en (7-17), ecuación que determina la dependencia radial de ψ. En consecuencia, la dependencia radial de la densidad de probabilidad, para r pequeña, es

$$\psi^*\psi \propto r^{2l} \qquad r \to 0 \quad (7\text{-}31)$$

De lo anterior se obtiene que el valor $\psi^*\psi$ en un volumen pequeño cercano a $r=0$ es relativamente grande sólo para $l=0$, disminuyendo muy rápidamente al aumentar l. La razón es que $r^0 \gg r^2 \gg r^4 \gg \ldots$, para $r \to 0$.

Se puede ver que existe cierta probabilidad de que el electrón se encuentre cerca del núcleo si $l=0$, pero la probabilidad de que esto suceda será mucho menor si $l=1$, y aún menor si $l=2$, etc. Bajo ciertas circunstancias, lo anterior puede dar lugar a efectos importantes, ya que la energía potencial del átomo puede llegar a ser muy grande en magnitud si el electrón está cerca del núcleo. Más adelante se verá que ésto es particularmente cierto en el caso de átomos con muchos electrones, que esencialmente tienen la misma propiedad. De hecho, el comportamiento r^l de las eigenfunciones, para r pequeña, es de capital importancia en la estructura de átomos multielectrónicos. Se verá también que el comportamiento r^l se debe físicamente al impulso angular del átomo, que depende de l.

Ahora, se procederá al estudio de la dependencia *angular* de las funciones de densidad de probabilidad

$$\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l} = R^*_{nl}R_{nl}\Theta^*_{lm_l}\Theta_{lm_l}\Phi^*_{m_l}\Phi_{m_l}$$

Se tiene de (7-19) que

$$\Phi^*_{m_l}(\varphi)\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{-im_l\varphi}e^{im_l\varphi} = 1$$

Por lo tanto, la densidad de probabilidad no depende de la coordenada φ. De esta manera, el comportamiento tridimensional de $\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}$ queda completamente especificado por el pro-

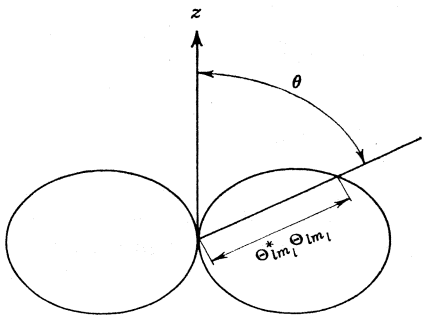


FIGURA 7-7

Diagrama polar del factor que determina la dependencia direccional de la densidad de probabilidad del átomo con un electrón.

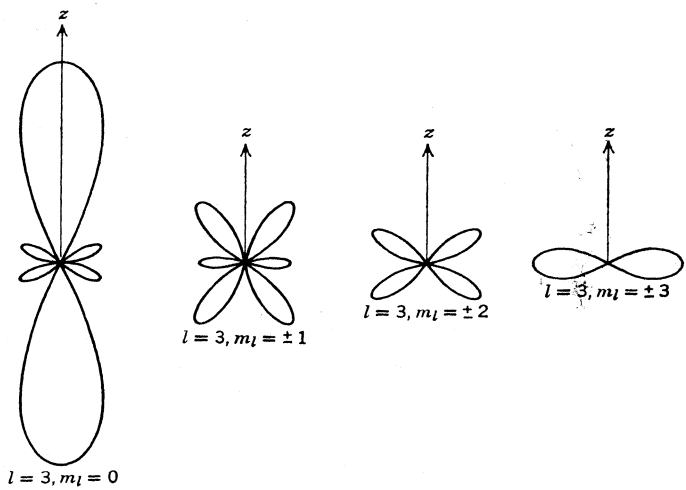


FIGURA 7-8

Diagramas polares de la dependencia direccional de las densidades de probabilidad para el átomo con un electrón para $l = 3$; $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$.

ducto de la cantidad $R^*_{nl}(r)R_{nl}(r) = P_{nl}(r)/r^2$ y la cantidad $\Theta^*_{lm_l}(\theta)\Theta_{lm_l}(\theta)$, que juega el papel de un factor de modulación dependiente de la dirección

La forma del factor $\Theta^*_{lm_l}(\theta)\Theta_{lm_l}(\theta)$ se puede presentar convenientemente usando diagramas polares, uno de los cuales se muestra en la figura 7-7. El origen del diagrama corresponde al punto $r=0$ (el núcleo), y el eje z se toma a lo largo de la dirección a partir de la cual se mide el angulo θ, es igual al valor de $\Theta^*_{lm_l}(\theta)\Theta_{lm_l}(\theta)$ para ese ángulo. Esos diagramas también se pueden imaginar como representativos de la dependencia direccional total de $\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}$, visualizando la superficie tridimensional que se obtiene rotando el diagrama 360° respecto al eje z, que es todo el intervalo angular de φ. La distancia del origen a un punto de la superficie, medida en una dirección especificada por los ángulos θ y φ, es igual a $\Theta^*_{lm_l}(\theta)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi^*_{m_l}(\varphi)\Phi_{m_l}(\varphi)$ para esos valores de θ y φ.

En la figura 7-8 se muestra un ejemplo de la dependencia de la forma $\Theta^*_{lm_l}(\theta)\Theta_{lm_l}(\theta)$ con el número cuántico m_l, por un conjunto de diagramas polares para $l=3$ y los siete valores posibles de m_l, para este valor de l, es decir, para $m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$. Nótese que a medida que el valor de m_l aumenta, la región donde se concentra $\Theta^*_{lm_l}(\theta)\Theta_{lm_l}(\theta)$, y por lo tanto $\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}$, cambia del eje z, al plano perpendicular al eje z. Algunas de las características de la dependencia de $\Theta^*_{lm_l}(\theta)\Theta_{lm_l}(\theta)$ con el número cuántico l, se indican en la figura 7.9 a través de un conjunto de diagramas polares para $m_l = +1$ y $l = 0,1,2,3,4$. En el caso $n = 1$, $l = m_l = 0$, que es el estado base del átomo, $\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}$ no depende ni de θ ni de φ y la densidad de probabilidad es esféricamente simétrica. Para otros estados, la concentración de densidad de probabilidad en el plano perpendicular a z, cuando $m_l = \pm l$, se vuelve más pronunciada, a medida que aumenta l. En la figura 7-10 se ha intentado eliminar la limitación de la página impresa bidimensional, representando mediante sombreo, la apariencia tridimensional de la función densidad de probabilidad para varios estados del átomo con un electrón.

Las funciones de densidad de probabilidad que se muestran en estas figuras generalmente tienen un conjunto de superficies esféricas y cónicas, definidas por ciertos valores de r y θ, sobre las cuales son iguales a cero. Estas superficies nodales, son análogas a los puntos nodales en los

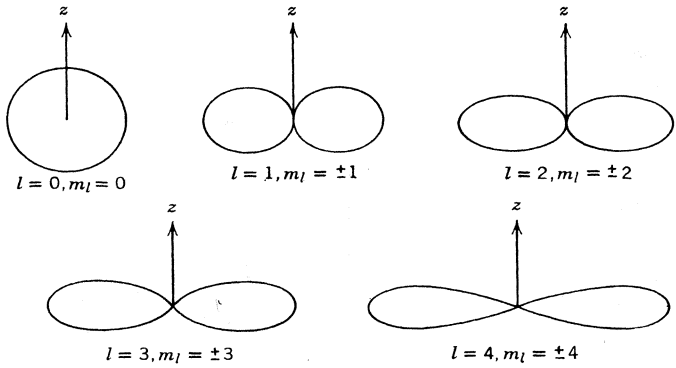


FIGURA 7-9

Diagramas polares de la dependencia direccional de las densidades de probabilidad para el átomo con un electrón para $l = 0, 1, 2, 3, 4$; $m_l = \pm l$.

cuales la densidad de probabilidad para una partícula ligada a un potencial unidimensional es igual a cero (véase, por ejemplo, la figura 6-32). Lo anterior es consecuencia del hecho de que las funciones de onda para una partícula ligada, deben ser ondas estacionarias con nodos fijos.

Sin embargo, si una colección de átomos de hidrógeno ha sido completamente aislada de sus alrededores, no es posible medir la posición de los electrones en cada átomo, sabiendo que están todos en un estado cuántico con un conjunto particular de números cuánticos n, l, m_l y por lo tanto, localizar la superficie nodal para ese estado. Si pudiera hacerse, ciertamente sería extraordinario ya que permitiría la determinación del eje z y ésto es equivalente a encontrar, para cada átomo, una dirección preferente en el espacio que debe ser esféricamente simétrica, porque el potencial de Coulomb del átomo $V = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ es esféricamente simétrico. De hecho, lo anterior no puede hacerse porque, en general, no es posible observar ninguno de los patrones de densidad de probabilidad de la figura 7-10 en medidas reales sobre átomos *libres* (es decir, átomos en ausencia completa de campos magnéticos o eléctricos externos). La única excepción es el estado esféricamente simétrico para $n = 1$, $l = m_l = 0$. La razón es que, con la excepción que se acaba de mencionar, cada estado es degenerado con varios estados que tienen el mismo valor de n. Como las energías de los átomos en estados degenerados son idénticas, no es posible separar experimentalmente unas de otras con técnicas que dejen la densidad de probabilidad invariante. Por lo tanto, lo único que puede medirse es la densidad de probabilidad promedio para todo el conjunto de estados degenerados entre sí. Cuando las funciones de densidad de probabilidad se promedian en esta manera, siempre resulta una función esféricamente simétrica.

Ejemplo 7-5. Calcular el promedio de las funciones de densidad de probabilidad, para el conjunto de estados degenerados correspondientes a la energía E_2.

Se tiene

$$\frac{1}{4}\left[\psi^*_{200}\psi_{200} + \psi^*_{21-1}\psi_{21-1} + \psi^*_{210}\psi_{210} + \psi^*_{211}\psi_{211}\right]$$

$$= \frac{1}{128\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-Zr/a_0}\left[\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)^2 + \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\left(\frac{1}{2}\text{sen}^2\,\theta + \frac{1}{2}\text{sen}^2\,\theta + \cos^2\theta\right)\right]$$

$$= \frac{1}{128\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-Zr/a_0}\left[\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)^2 + \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] \qquad (7\text{-}32)$$

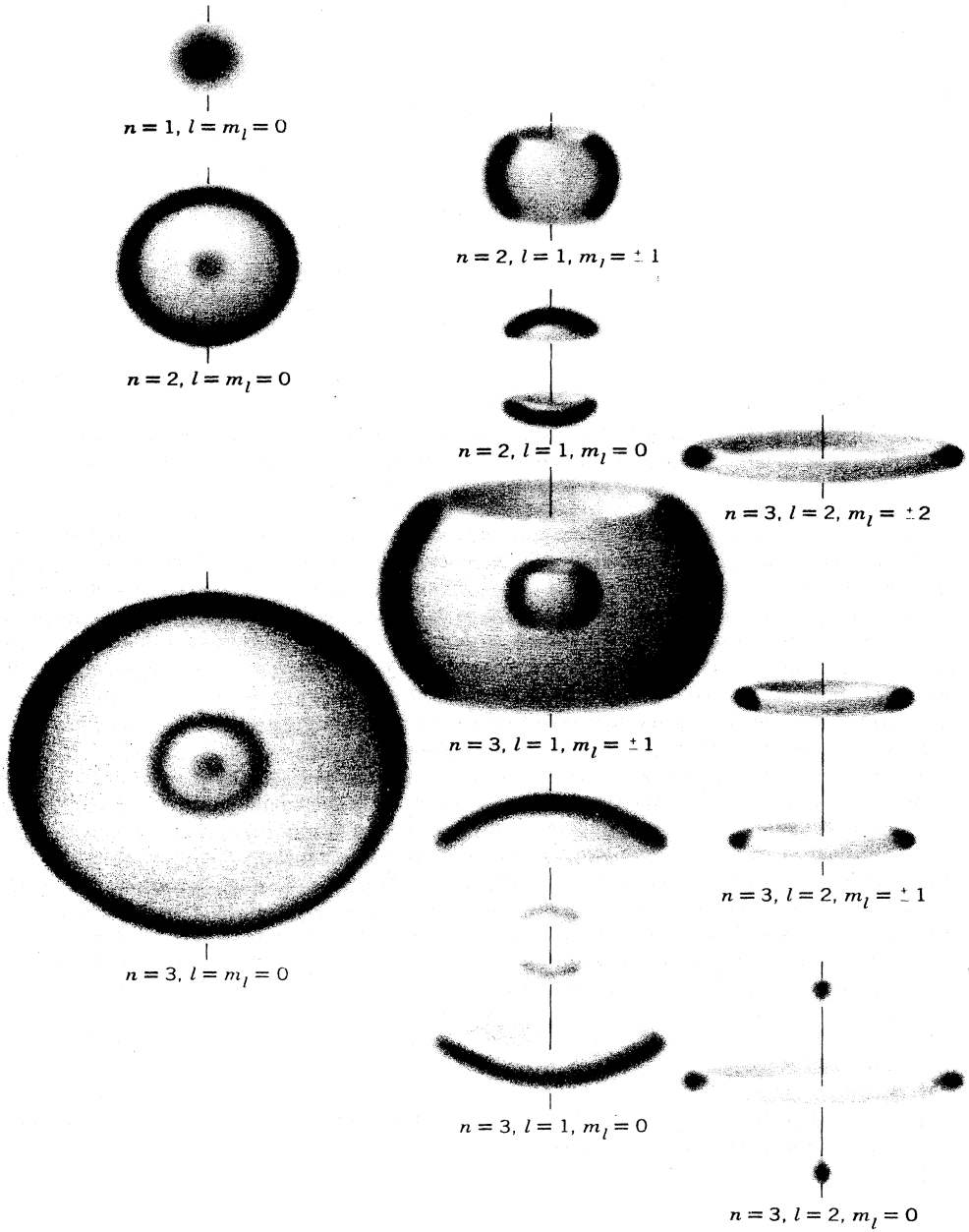


FIGURA 7-10

Concepción artística de la apariencia tridimensional de varias funciones de densidad de probabilidad para el átomo con un electrón. Para cada uno de los dibujos la línea representa el eje z. Si se combinan las densidades de probabilidad para n y l dadas, el resultado es esféricamente simétrico.

Esta distribución esféricamente simétrica sería el resultado de una secuencia de medidas de la posición de los electrones en átomos monoelectrónicos de energía total E_2. Desde luego, no puede usarse para determinar la dirección del eje z y, por lo tanto, no hay contradicción con el hecho de que esta dirección inicialmente se escogió de una forma completamente arbitraria.

Obsérvese que aún para cada subconjunto de estados incluyendo todos los valores posibles de m_l para una n y l dadas (una subcapa), la suma de las densidades de probabilidad es esféricamente simétrica. Es decir, $\psi^*_{200}\psi_{200}$ y $\psi^*_{21-1}\psi_{21-1} + \psi^*_{210}\psi_{210} + \psi^*_{211}\psi_{211}$ son esféricamente simétricas. Esta importante propiedad se muestra en la figura 7-10. Más adelante se utilizará en los argumentos relacionados con átomos multielectrónicos y núcleos. ◀

Por otra parte, considere una situación en la cual la orientación del eje z no es arbitraria, porque *existe* una dirección preferente definida, por ejemplo, por la dirección en que se aplica a la colección de átomos de hidrógeno, un campo eléctrico o magnético. En un campo, como ese, como se verá después, los estados cuánticos no son degenerados y se pueden realizar medidas de la densidad de probabilidad de átomos en un estado particular. De hecho, estas medidas se utilizan para determinar la dirección del campo externo.

Para ayudar al estudiante a entender las ideas que se acaban de estudiar, se reafirmarán como sigue:

1. Si el comportamiento del átomo está gobernado por un potencial con simetría esférica, como el potencial de Coulomb, que sólo depende de la *distancia* del electrón al núcleo, ninguna de las propiedades del átomo deberá marcar una *dirección* particular en el espacio, ya que todas las direcciones son equivalentes.
2. Si el átomo se coloca en un campo eléctrico externo, la simetría esférica se destruye y la dirección definida por el campo externo se vuelve única.
3. Cuando una dirección es única, se escoge un eje del sistema de coordenadas para que esté en esa dirección preferente ya que simplifica la descripción de la situación física. Se pueden escoger otras direcciones, pero esto complica innecesariamente la descripción matemática. (Por ejemplo, en electromagnetismo, cuando se trata el alambre cilíndrico, es muy ventajoso tomar un eje del sistema de coordenadas a lo largo del eje del cilindro).
4. Por convencionalismo, al eje preferente se le llama eje z. (Esto viene probablemente de las coordenadas cilíndricas, en las que el eje en torno al cual varían las coordenadas angulares, se le llama eje z). Sin embargo, de la misma forma se le podría haber llamado eje x o y.
5. Aun cuando no hay una dirección preferente, porque no hay un campo externo aplicado al átomo, se debe escoger *alguna* dirección arbitraria en el espacio para el eje z del sistema de coordenadas. Pero en este caso el eje z no es físicamente único; es simplemente una construcción matemática. Por lo tanto, el haberse escogido así no debe tener grandes consecuencias.

Debe notarse que un campo aplicado *uniforme* puede servir para definir sólo *una* dirección preferente. Como ya se indicó, un campo como ese podrá, generalmente, quitar parte de la degeneración de las eigenfunciones, y las densidades de probabilidad que dependen del ángulo θ se podrán medir. Sin embargo, las densidades de probabilidad permanecen independientes del ángulo φ, ya que $\psi^*\psi \propto \Phi^*_{m_l}(\varphi)\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{-im_l\varphi}e^{im_l\varphi} = 1$ para cada eigenfunción. Es decir, las densidades de probabilidad mantienen su simetría axil de rotación en torno a la dirección del campo aplicado, como en realidad debe ser el caso.

Un campo aplicado *no uniforme* puede utilizarse para definir direcciones preferentes *adicionales* y no es sorprendente que dichos campos destruyan la simetría de rotación axil de la densidad de probabilidad de los átomos bajo su influencia. Aunque esta posibilidad no ha sido incluida en este desarrollo puesto que no será necesario, es fácil, si se requiere, tomarse en cuenta por medio de soluciones particulares de (7-15) de la forma $\Phi_{m_l}(\varphi) = \cos m_l\varphi$ o $\Phi_{m_l}(\varphi) = \operatorname{sen} m_l\varphi$, en lugar de las que se tomaron anteriormente. Si no hay campo aplicado, o con un campo aplicado uniforme, la eigenfunción conocida con $\cos m_l\varphi$ es degenerada con las eigenfunciones asociadas con $\operatorname{sen} m_l\varphi$, de manera que las medidas de la densidad de probabilidad siempre resultarán en una combinación independiente de $\varphi \propto \cos^2 m_l\varphi + \operatorname{sen}^2 m_l\varphi = 1$, igual que con las eigenfunciones que se usaron antes. Sin embargo, en el caso del campo aplicado no uniforme la degeneración puede desaparecer y se podrán observar las densidades de probabilidad que no tengan simetría de rotación axil. En química, frecuentemente se usan las soluciones del tipo $\Phi_{m_l}(\varphi) = \cos m_l\varphi$ y $\Phi_{m_l}(\varphi) = \operatorname{sen} m_l\varphi$, ya que un átomo en una molécula es actuado por un campo altamente no uniforme producido por los otros átomos.

En la siguiente sección se demostrará que los números cuánticos l y m_l están relacionados con la magnitud L del impulso angular del electrón y a su componente L_z, por medio de:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$
$$L_z = m_l\hbar$$

Esto se menciona ahora, porque representa una clave importante para la interpretación de la dependencia de $\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}$. Considérese el caso $m_l = 1$; entonces $L_z = l\hbar$, que es casi igual a $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$. En este caso, el vector impulso angular debe tener una dirección muy aproximada a la del eje z. Esto quiere decir que en un átomo de Bohr, la órbita del electrón estará en un plano casi perpendicular al eje z, como se muestra en la figura 7-11. Para valores crecientes de l, el valor de $l\hbar$ se aproxima al valor $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ de manera que L_z se aproxima a L. Esto significa que disminuye el ángulo entre el vector impulso angular y el eje z. En términos de la descripción de Bohr, lo anterior requiere que la órbita esté en un plano aún más cerca de la perpendicular al eje z. Examinando los diagramas polares de la figura 7-9, se encuentra que la correspondencia entre estas características de $\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}$ y la imagen de una órbita de Bohr. Para $m_l = 0$ se tiene que $L_z = 0$ y el vector impulso angular debe ser perpendicular al eje z. En el átomo de Bohr esto significará que el plano de la órbita contiene el eje z. En el diagrama polar para $l = 3$, $m_l = 0$ de la figura 7-8, algo se indica respecto a este comportamiento.

Aunque existen muchos puntos en los que la correspondenia entre la teoría cuántica del átomo con un electrón y el modelo de Bohr es muy cercana, también existen ciertas diferencias sorprendentes. En ambos tratamientos, el estado base corresponde al número cuántico $n = 1$ y el valor de la energía total es el mismo. Sin embargo, para el modelo de Bohr el impulso angular orbital para este estado es $L = n\hbar = \hbar$, mientras que en mecánica cuántica es $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar = 0$, ya que $l = 0$ cuando $n = 1$. Existen una gran cantidad de evidencias, de medidas de espectros atómicos y otras, demostrando que es correcta la predicción de la mecánica cuántica para impulso angular orbital cero en el estado base. Esta predicción también concuerda con la que se obtiene utilizando las técnicas que se vieron anteriormente, para calcular los valores de expectación de la energía cinética total del electrón en el estado base y de la energía cinética asociada únicamente al movimiento radial. Se encuentra que los dos valores son iguales, lo que implica que el movimiento es totalmente radial en ese estado. Si el modelo de Bohr se modificara de manera tal que permitiera estados de impulso angular nulo, la órbita para uno de dichos estados sería una oscilación radial en la que el electrón pasaría directamente a través del núcleo, y la oscilación se llevaría a cabo en cualquier dirección del espacio. Esto correspondería, en cierto modo, a una densidad de probabilidad o distribución de carga esféricamente simétrica, similar a la que predice la mecánica cuántica y se observa experimentalmente. De cualquier manera, resulta difícil visualizar el movimiento de un electrón en el estado base del átomo mecánico cuántico. Es decir, resulta difícil hacer una analogía con una imagen clásica, como la

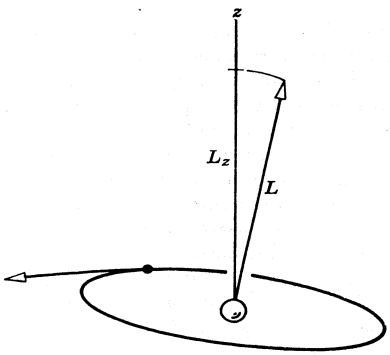


FIGURA 7-11

Orbita de Bohr contenida en un plano casi perpendicular al eje z.

de Bohr. Sin embargo, esta situación, no es única, ya que es igualmente difícil visualizar el movimiento de un electrón que viaja por un aparato de difracción de doble rendija.

7.8 Impulso angular orbital

Ahora se procederá a justificar las relaciones:

$$L_z = m_l \hbar \tag{7-33}$$

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \tag{7-34}$$

entre los números cuánticos m_l y l, y la componente z, L_z, y magnitud L del impulso angular del electrón en su movimiento "orbital" en torno al centro de un átomo. La justificación requiere un poco de esfuerzo que bien vale la pena. Se ha visto que estas relaciones son muy útiles en la interpretación de la dependencia angular de las funciones de densidad de probabilidad para un átomo con un electrón. A medida que se continúe el estudio de la física cuántica, se verá que las relaciones del impulso angular son extremadamente importantes en el estudio de todos los átomos (y núcleos). La razón principal es que en la mayoría de las circunstancias la componente z y la magnitud de los impulsos angulares de las partículas en sistemas microscópicos, permanece constante. Desde un punto de vista clásico, ésto sucede debido a que en la mayoría de los sistemas las partículas se mueven en potenciales esféricamente simétricos incapaces de ejercer impulsos rotativos sobre ellas. Se encontrará que de todas las cantidades que se pueden utilizar para describir átomos (y núcleos), el impulso angular y la energía total son casi las únicas que permanecen constantes. Una consecuencia de lo anterior es que la mayoría de los experimentos sobre tales sistemas impliquen medidas del impulso angular y la energía total. En consecuencia, la mecánica cuántica debe ser capaz de hacer predicciones tanto del impulso angular como de la energía total. Otro paralelismo entre estas dos propiedades es que ambas están cuantizadas. En otras palabras, las relaciones (7-33) y (7-34) donde se *afirma* que L_z y L tienen *precisamente* los valores $m_l\hbar$ y $\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, son relaciones de cuantización de la misma forma como la ecuación cuántica en que se afirma que la energía total E, del átomo con un electrón, tiene precisamente los valores $-\mu Z^2 e^4/(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2$. Efectivamente, la cuantización del impulso angular es tan importante como la cuantización de la energía. La única razón por la que no apareció antes en el tratamiento de la mecánica cuántica de Schrodinger, es que dicho tratamiento se restringió a sistemas unidimensionales. Desde luego, el impulso angular es la cantidad dinámica que establece la diferencia entre los sistemas tridimensionales reales, y las idealizaciones unidimensionales donde no tiene significado.

El *impulso angular* de una partícula, respecto al origen de cierto sistema de coordenadas, es la cantidad vectorial **L** definida por la ecuación.

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{7-35a}$$

donde **r** es el vector de posición de la partícula respecto del origen y **p** es el vector impulso lineal de la misma. Si se evalúan las componentes en coordenadas cartesianas del vector producto, es fácil demostrar que las componentes de **L** son:

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y \\ L_y &= zp_x - xp_z \\ L_z &= xp_y - yp_x \end{aligned} \tag{7-35b}$$

donde x,y,z son las componentes de **r** y p_x, p_y, p_z son las componentes de **p**.

Para poder estudiar en mecánica cuántica, la *cantidad dinámica* impulso angular, se construyen los *operadores* asociados. Lo anterior se realiza sustituyendo p_x, p_y, p_z por sus

equivalentes cuánticos: $-i\hbar\,\partial/\partial x$, $-i\hbar\,\partial/\partial y$, $-i\hbar\,\partial/\partial z$, de acuerdo con la extensión obvia de (5-32). Por lo tanto, los operadores para las tres componentes del impulso angular son

$$L_{x_{op}} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_{y_{op}} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{7-36}$$

$$L_{z_{op}} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Dado que se deben usar coordenadas polares esféricas, estas expresiones deben transformarse a dichas coordenadas. El apéndice I muestra cómo hacerlo. Los resultados son:

$$L_{x_{op}} = i\hbar\left(\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_{y_{op}} = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{7-37}$$

$$L_{z_{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

También se tendrá interés en el cuadrado de la magnitud del vector impulso angular **L**, que es

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Como se indica en el apéndice I, el operador asociado en coordenadas polares esféricas es:

$$L_{op}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{7-38}$$

El primer paso para derivar las ecuaciones de cuantización del impulso angular, implican el uso de los operadores para calcular los valores de expectación de la componente z de **L**, y del cuadrado de su magnitud, para un electrón en el estado cuántico n, l, m_l del átomo con un electrón. De acuerdo con la extensión tridimensional de la ecuación (5-34), el valor de expectación de L_z es:

$$\overline{L_z} = \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\Psi^* L_{z_{op}}\Psi r^2\operatorname{sen}\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi$$

La cantidad $r^2\operatorname{sen}\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi$ es el elemento de volumen en coordenadas polares esféricas y las integraciones se realizan sobre el intervalo completo de las tres coordenadas. Con el fin de simplificar la notación, sin ocasionar confusión, se escribirá la expresión anterior como.

$$\overline{L_z} = \int\Psi^* L_{z_{op}}\Psi\,d\tau$$

Ahora, $d\tau$ está en lugar del elemento de volumen $r^2\operatorname{sen}\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi$, y $\int$ está en lugar de las tres integrales definidas $\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}$. El mismo tipo de notación abreviada se usará en el resto de

este capítulo y en los siguientes. Continuando con el cálculo $\overline{L_z}$, expresando la función de onda como el producto de la eigenfunción y el factor exponencial en el tiempo, se obtiene:

$$\overline{L_z} = \int e^{iE_n t/\hbar} \psi^*_{nlm_l} L_{z_{op}} e^{-iE_n t/\hbar} \psi_{nlm_l} \, d\tau$$

ó

$$\overline{L_z} = \int \psi^*_{nlm_l} L_{z_{op}} \psi_{nlm_l} \, d\tau \tag{7-39}$$

Similarmente, el valor de expectación de L^2 es:

$$\overline{L^2} = \int \psi^*_{nlm_l} L^2_{op} \psi_{nlm_l} \, d\tau \tag{7-40}$$

Para evaluar las integrales que aparecen en las últimas dos ecuaciones numeradas, es necesario primero evaluar $L_{z_{op}}\psi_{nlm_l}$ y $L^2_{op}\psi_{nlm_l}$.

Ejemplo 7-6. Evaluar $L_{z_{op}}\psi_{nlm_l}$, donde $L_{z_{op}} = -i\hbar\partial/\partial\varphi$, y donde ψ_{nlm_l} es una eigenfunción para un átomo con un electrón.
Se tiene

$$L_{z_{op}}\psi_{nlm_l} = -i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm_l}}{\partial \varphi}$$

ya que

$$\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)$$

se obtiene

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm_l}}{\partial \varphi} = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\left[-i\hbar \frac{d\Phi_{m_l}(\varphi)}{d\varphi}\right]$$

De acuerdo con (7-19)

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{im_l\varphi}$$

de manera que,

$$\frac{d\Phi_{m_l}(\varphi)}{d\varphi} = im_l e^{im_l\varphi} = im_l\Phi_{m_l}(\varphi)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_{nlm_l}}{\partial \varphi} &= R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)[-i\hbar i m_l \Phi_{m_l}(\varphi)] \\ &= m_l \hbar R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi) \end{aligned}$$

y se obtiene la respuesta

$$L_{z_{op}}\psi_{nlm_l} = m_l\hbar\psi_{nlm_l} \tag{7-41}$$

◀

A pesar de que no se tiene una expresión concisa para las funciones $\Theta_{lm_l}(\theta)$, las cuales deben diferenciarse para calcular $L^2_{op}\psi_{nlm_l}$, se sabe que estas ecuaciones satisfacen la ecuación deferencial (7-16). Usando este hecho, no es difícil demostrar que:

$$L^2_{op}\psi_{nlm_l} = l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm} \tag{7-42}$$

Sustituyendo (7-41) del ejemplo 7-6 en (7-39), que es

$$\overline{L_z} = \int \psi^*_{nlm_l} L_{z_{op}} \psi_{nlm_l} \, d\tau$$

resulta trivial evaluar $\overline{L_z}$. Se tiene

$$\overline{L_z} = m_l \hbar \int \psi^*_{nlm_l} \psi_{nlm_l} \, d\tau$$

Sin embargo, se sabe que el valor de esta integral es uno, ya que es igual a la densidad de probabilidad integrada sobre todo el espacio, es decir, la probabilidad de encontrar al electrón en algún lugar. Por lo tanto, se obtiene

$$\overline{L_z} = m_l \hbar \tag{7-43}$$

En una forma similar, se sustituye (7-42) en (7-40) que es

$$\overline{L^2} = \int \psi^*_{nlm_l} L^2_{op} \psi_{n\ m_l} \, d\tau$$

Para obtener

$$\overline{L^2} = l(l+1)\hbar^2 \int \psi^*_{nlm_l} \psi_{nlm_l} \, d\tau$$

$$\overline{L^2} = l(l+1)\hbar^2 \tag{7-44}$$

Ahora comparando los resultados del cálculo de valores de expectación, (7-43) y (7-44), con las ecuaciones de cuantización que se trata de verificar y que se pueden escribir como:

$$L_z = m_l \hbar \tag{7-45}$$

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \tag{7-46}$$

Evidentemente las primeras concuerdan con las últimas, pero no son pruebas de estas. Las relaciones de cuantización hacen afirmaciones más fuertes respecto a los valores de L_z y L^2. Estas relaciones dicen que *cualquier* medición del impulso angular de un electrón en el estado atómico n,l,m_l, *siempre* dará $L_z = m_l \hbar$ y $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ ya que, en ese estado, estas cantidades poseen *precisamente* los valores citados. Sin embargo, los valores de expectación, sólo establecen que los valores citados se obtendrán en promedio, es decir, cuando los resultados de un número grande de medidas de L_z y L^2 sean promediados.

Para completar la prueba de las relaciones de cuantización, es cuestión de continuar con la línea que se ha venido seguiendo. Por ejemplo, al calcular el valor de expectación de alguna potencia de L_z, por ejemplo L_z^2, se encuentra que $\overline{L_z^2} = (m_l \hbar)^2$. Inmediatamente, esto nos lleva a la conclusión de que no solamente L_z es igual a $m\hbar$ en promedio, es decir, $\overline{L_z} = m_l \hbar$, sino que L_z debe ser igual a $m\hbar$ siempre, es decir $L_z = m_l \hbar$. El punto es que si L_z fluctuará en torno a su valor promedio $m_l \hbar$ no sería posible obtener $\overline{L_z^2} = (m_l \hbar)^2$, ya que, cuando se promedia una potencia de L_z mayor que la primera, se le da más peso a las fluctuaciones por encima del promedio que a las fluctuaciones por abajo de él. Con el fin de continuar la interpretación del impulso angular de átomos con un electrón, se dejarán los detalles de esta demostración a la siguiente sección. Allá se obtendrá la interesante conclusión de que L_x y L_y, las componentes x e y del impulso angular orbital, *no* están sujetas a las relaciones de cuantización.

El que ψ_{nlm_l} no describa un estado con componentes x e y del impulso angular orbital bien definidas, ya que estas cantidades no están cuantizadas, es un hecho misterioso desde el punto de vista de la mecánica clásica. De acuerdo con la ley de conservación del impulso angular de la mecánica clásica, el vector impulso angular orbital de un electrón moviéndose bajo la influencia de un potencial esféricamente simétrico $V(r)$, de un átomo con un electrón en el espacio libre, debería estar completamente fijo en magnitud y dirección y sus tres componentes deberían tener valores bien definidos. La razón estriba en que no habría impulsos rotativos actuando sobre el electrón. El hecho de que este resultado no se obtenga en la teoría cuántica es una consecuencia de que existe un principio de incertidumbre que afirma que no se pueden conocer, simultáneamente y con toda precisión, dos componentes del impulso angular. Como la componente z del impulso angular orbital tiene precisamente el valor $m_l\hbar$, la relación de incertidumbre requiere que los valores de las componentes x y y estén indefinidos. Calculando los valores promedio de estas componentes, $\overline{L_x}$ y $\overline{L_y}$, se encuentra que ambos son iguales a cero. Por lo tanto, se puede pensar que la orientación, del vector impulso angular orbital de un electrón moviéndose en un potencial esféricamente simétrico, se puede imaginar como que está cambiando constantemente, de manera que sus componentes x y y fluctúan respecto a un valor promedio que es cero, mientras que su componente z y su magnitud, permanecen constantes. A este resultado se le puede llamar la *ley de conservación del impulso angular orbital mecánico-cuántico.*

Muchas de las propiedades del impulso angular orbital se pueden representar convenientemente por medio de un modelo vectorial. Considérese el conjunto de estados que tienen valores comunes del número cuántico l. Para cada uno de estos estados, la longitud del vector impulso angular orbital es $L/\hbar = \sqrt{l(l+1)}$, en unidades de $\hbar$. La componente z de este vector será, $L_z/\hbar = m_l$ en las mismas unidades. Dependiendo del valor de m_l, la componente z puede tomar cualquier valor entero entre $L_z/\hbar = -l$ hasta $L_z/\hbar = +l$. En la figura 7-12 se muestra el caso para $l = 2$. La figura describe los vectores impulso angular para cada uno de los cinco estados correspondientes a los cinco valores posibles de m_l para este valor de l. Si para cada uno de estos estados, L_x y L_y fluctúan en torno a sus valores promedio que son iguales a cero, los vectores que describen el estado se preceden aleatoriamente en la superficie cónica alrededor del eje z, de manera que se satisface la ley de conservación del impulso angular en mecánica cuántica. La orientación espacial del vector impulso angular puede determinarse con la mayor precisión para aquellos estados con $m_l = \pm l$. Sin embargo, aún para estos estados, existe una indeterminación ya que el vector puede estar en cualquier parte sobre la superficie cónica de semiángulo $\cos^{-1}[l/\sqrt{l(l+1)}]$. En el límite clásico, cuando $l \to \infty$, este ángulo se hace despreciablemente pequeño y de manera que, en el límite clásico el vector impulso angular para los estados $m_l = \pm l$ está restringido a permanecer siempre casi a lo largo del eje z y, por lo tanto, esencialmente está fijo en el espacio. Lo anterior concuerda con el comportamiento predicho por la teoría clásica, es decir, con la ley de conservación del impulso angular clásica.

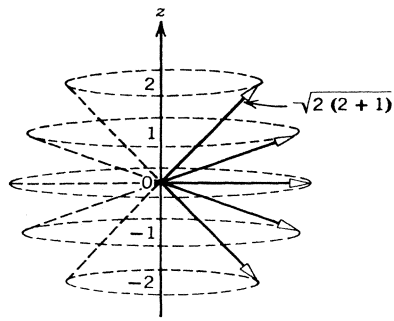


FIGURA 7-12

Representación de los vectores de impulso angular (medidos en unidades de $\hbar$) para todos los estados posibles con $l = 2$. Para cada estado cada vector se precede aleatoriamente en torno al eje z conservando una magnitud y componente z constantes.

El número cuántico m_l determina la orientación espacial del vector impulso angular orbital para el átomo con un electrón y, en cierta manera, determina la orientación en el espacio del átomo mismo. Ahora bien, como el potencial de Coulomb esféricamente simétrico implica que no existe una dirección preferente en el espacio en el que se encuentra al átomo, se puede explicar por qué la teoría predice que la energía total del átomo no depende del número m_l, el cual determina la orientación. Asimismo, se puede entender por qué las eigenfunciones son degeneradas respecto al número cuántico m_l. Simplemente, la energía del átomo no depende de su orientación en el espacio vacío.

7.9 Ecuaciones de eigenvalores

A continuación se completará la derivación de las condiciones de cuantización del impulso angular orbital, que se empezó en la sección anterior.

Para estudiar la cuantización del impulso angular orbital, primero se puso atención a su componente z, L_z. Ahora bien, si la condición de cuantización para la componente z dada por (7-45) es válida, entonces cualquier medida de L_z siempre dará el mismo preciso valor especificado por la condición de cuantización, a saber,

$$L_z = m_l\hbar \tag{7-47}$$

Además las medidas de cualquier potencia de L_z, digamos L_z^2, siempre dará el mismo valor $L_z^2 = (m_l\hbar)^2$. Consecuentemente, el valor de expectación de L_z al cuadrado, será justamente $\overline{L_z^2} = (m_l\hbar)^2$. Obsérvese que como también se tiene $\overline{L_z} = m_l\hbar$, esto quiere decir que

$$\overline{L_z^2} = \overline{L_z}^2 \tag{7-48}$$

Es decir, si la condición de cuantización (7-47) es válida, el valor de expectación de L_z al cuadrado es igual al cuadrado del valor de expectación de L_z.

Por otra parte, como en (7-43) se probó que $\overline{L_z} = m_l\hbar$, en cualquier caso; entonces si (7-47) no es válido, medidas de L_z darían diversos valores, pero sujetos a la condición de que su promedio sea $m_l\hbar$. Si los valores de L_z fluctúan en torno a su valor promedio $m_l\hbar$ entonces el valor de expectación del cuadrado de L_z ya no será igual al cuadrado de $m_l\hbar$. La razón es que cuando se promedian potencias mayores de L_z, como L_z^2, se le da más peso a los casos en que L_z es mayor que $\overline{L_z}$, y menos peso a los no menos numerosos casos en que L_z es menor que $\overline{L_z}$. En esta situación $\overline{L_z^2} \neq (m_l\hbar)^2$, de manera que $\overline{L_z^2} \neq \overline{L_z}^2$.

En la tabla 7-3 se muestra un ejemplo en el que se aplican las ideas que se acaban de estudiar, respecto al cálculo de promedios al cuadrado y promedios de cuadrados, a un grupo de niños cuyas edades individuales son de 1, 2, y 3 años. Examinando la tabla se puede ver que cuando primero se elevan al cuadrado las edades

TABLA 7-3 Cuadrado del promedio y promedio de los cuadrados de un conjunto de números fluctuantes

$$A = 1, 2, 3$$

$$\bar{A} = \frac{1 + 2 + 3}{3} = \frac{6}{3} = 2$$

$$\bar{A}^2 = 4$$

$$A^2 = 1, 4, 9$$

$$\overline{A^2} = \frac{1 + 4 + 9}{3} = \frac{14}{3} = 4.67$$

$$\Delta A \equiv \sqrt{\overline{A^2} - \bar{A}^2} = \sqrt{4.67 - 4} = \sqrt{0.67} = 0.82$$

TABLA 7-4 Cuadrado del promedio y promedio de los cuadrados de un conjunto de números no fluctuantes

$$A = 2, 2, 2$$

$$\bar{A} = \frac{2 + 2 + 2}{3} = \frac{6}{3} = 2$$

$$\bar{A}^2 = 4$$

$$A^2 = 4, 4, 4$$

$$\overline{A^2} = \frac{4 + 4 + 4}{3} = \frac{12}{3} = 4$$

$$\Delta A \equiv \sqrt{\overline{A^2} - \bar{A}^2} = \sqrt{4 - 4} = 0$$

y luego se promedian, se obtiene un resultado mayor que cuando las edades se promedian primero y luego el promedio se eleva al cuadrado. Se encuentra que ésto siempre se cumple, si se elevan las edades a una potencia mayor que uno, y que esté entre las fluctuaciones de las edades. Sin embargo, si todos los niños del grupo tienen precisamente la misma edad, y por lo tanto la edad promedio, entonces resulta indiferente el orden en que se realicen las operaciones ya que el promedio de los cuadrados, es igual al cuadrado de los promedios. Un ejemplo de esa situación se muestra en la tabla 7-4.

Para otra ejemplificación de estas ideas, considérese la cantidad $\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$. Esta cantidad se utiliza para medir las fluctuaciones que se observan cuando se mide la coordenada x de una partícula, como se mencionó en el ejemplo 5-10. Si no hubiese fluctuaciones entonces $\overline{x^2} = \bar{x}^2$. Sin embargo, el principio de incertidumbre requiere que haya fluctuaciones en x (que serán mayores cuanto más pequeñas sean las fluctuaciones en el impulso lineal p) y como resultado $\overline{x^2} > \bar{x}^2$, de manera que la diferencia entre $\overline{x^2}$ y $\bar{x}^2$ aumenta a medida que aumentan las fluctuaciones en x, consecuentemente, $\sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$ es una medida de estas fluctuaciones.

Ahora bien, es fácil demostrar la validez de la relación expresada, por (7-48), $\overline{L_z^2} = \overline{L_z}^2$, y, por lo tanto, la validez de la condición de cuantización $L_z = m_l \hbar$ de (7-47). Para demostrarlo, se utiliza dos veces (7-41), $L_{z_{\text{op}}} \psi_{nlm_l} = m_l \hbar \psi_{nlm_l}$, para calcular $\overline{L_z^2}$. Siguiendo la extensión tridimensional de la fórmula para calcular valores de expectación, se tiene:

$$\overline{L_z^2} = \int \Psi^* L_{z_{\text{op}}}^2 \Psi \, d\tau$$

Lo que resulta inmediatamente

$$\overline{L_z^2} = \int \psi_{nlm_l}^* L_{z_{\text{op}}}^2 \psi_{nlm_l} \, d\tau$$

La cantidad dinámica L_z^2 es el producto de dos factores de la forma L_z

$$L_z^2 = L_z \cdot L_z$$

De acuerdo con la fórmula para obtener valores de expectación, el operador, $L_{z_{\text{op}}}^2$ que se obtiene de dicha cantidad dinámica, es el producto de dos operadores de la forma $L_{z_{\text{op}}}$. Por lo tanto,

$$L_{z_{\text{op}}}^2 \psi_{nlm_l} = L_{z_{\text{op}}} \cdot L_{z_{\text{op}}} \psi_{nlm_l}$$

En otras palabras, $L_{z_{\text{op}}}^2 \psi_{nlm_l}$ significa que $L_{z_{\text{op}}}$ opera dos veces sobre ψ_{nlm_l}. Pero de acuerdo con (7-41)

$$L_{z_{\text{op}}} \psi_{nlm_l} = m_l \hbar \, \psi_{nlm_l}$$

Por lo tanto, cada operación de $L_{z_{op}}$ sobre ψ_{nlm_l} resulta la misma función ψ_{nlm_l}, multiplicada por un factor constante $m_l\hbar$. De esta manera, el resultado de dos operaciones es multiplicar ψ_{nlm_l} por dos factores $m_l\hbar$. Es decir:

$$L^2_{z_{op}}\psi_{nlm_l} = (m_l\hbar)^2\psi_{nlm_l}$$

Si lo anterior se conoce, inmediatamente se obtiene

$$\begin{aligned}\overline{L_z^2} &= \int \psi^*_{nlm_l}(m_l\hbar)^2\psi_{nlm_l}\,d\tau \\ &= (m_l\hbar)^2\int \psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}\,d\tau \\ &= (m_l\hbar)^2 \\ &= \overline{L_z}^2\end{aligned}$$

en donde se utiliza el hecho de que la integral de $\psi^*_{nlm_l}\psi_{nlm_l}$ sobre todo el espacio, es igual a uno, por la condición de normalización. Como (7-48) ya se verificó, se completa entonces, la verificación de la condición de cuantización $L_z = m_l\hbar$. La demostración de la validez a la condición de cuantización $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ se lleva a cabo de un modo completamente paralelo.

Obsérvese que estas demostraciones dependen de (7-41) y (7-42), $L_{z_{op}}\psi_{nlm_l} = m_l\hbar\psi_{nlm_l}$ y $L^2_{op}\psi_{nlm_l} = l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm_l}$. Estas ecuaciones afirman el hecho sorprendente de que el resultado de operar sobre las eigenfunciones del átomo con un electrón, ψ_{nlm_l}, con el operador diferencial $L_{z_{op}}$, es equivalente a multiplicar dichas eigenfunciones por la constante $m_l\hbar$, mientras que el resultado de operar con el operador diferencial L^2_{op} es simplemente multiplicar por $l(l+1)\hbar^2$. Desde luego, estos resultados no son típicos de lo que sucede cuando un operador diferencial opera sobre una función. Así por ejemplo, operando sobre la función $f(x)=x^2$, con el operador diferencial d/dx se obtiene una función completamente diferente, a saber, $f'(x) = 2x$. Como un ejemplo más, no es difícil demostrar que el resultado de operar sobre ψ_{nlm_l} con los operadores $L_{x_{op}}$ o $L_{y_{op}}$ es producir funciones nuevas de r, θ, φ en las cuales estas variables intervienen de modo muy diferente de como intervienen en la función ψ_{nlm_l}. Es decir,

$$L_{x_{op}}\psi_{nlm_l} \neq (\text{const})\psi_{nlm_l} \tag{7-49}$$

$$L_{y_{op}}\psi_{nlm_l} \neq (\text{const})\psi_{nlm_l} \tag{7-50}$$

Las ideas que se han desarrollado en el proceso de verificar las condiciones de cuantización del impulso angular, pueden extenderse para darnos una visión más profunda de la teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica. También pueden usarse como guía en las teorías más sofisticadas, tales como la *mecánica matricial* de Heisenberg, pero estos temas se dejarán a libros más avanzados. Aquí solo se afirmará que las propiedades asociadas con (7-41) y (7-42) son perfectamente generales. Es decir, *siempre que la cantidad dinámica tenga precisamente el valor F en el estado cuántico descrito por la función ψ, entonces dicha función satisface la relación*

$$f_{op}\psi = F\psi \tag{7-51}$$

donde f_{op} es el operador correspondiente a f.

Se demostrará también que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se puede escribir en la misma forma que (7-51). Para ésto, considere la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en coordenadas cartesianas,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V\psi = E\psi$$

Se vuelve a escribir como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V\right]\psi = E\psi$$

Comparando (7-3) con (7-4), se encuentra que el paréntesis cuadrado corresponde justamente al operador e_{op} para la energía total. Por lo tanto, se tiene,

$$e_{op}\psi = E\psi$$

En esta relación, E es uno de los valores permitidos de modo preciso de la energía total, descrito por el potencial V. El sistema también queda descrito por el operador de energía total e_{op}.

La relación (7-51) en forma general, es llamada, *ecuación de eigenvalores,* donde se dice que ψ es una *eigenfunción del operador* f_{op}, y F su *eigenvalor* correspondiente. Esta terminología es exactamente igual a la usada para el caso particular de la ecuación de eigenvalores del operador de energía total, es decir, en el caso de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Al operador de energía total e_{op} algunas veces se le llama el *Hamiltoniano.*

Estas consideraciones llevan a la importante conclusión de que, como (7-49) y (7-50) demuestran que ψ_{nlm_l} no es una eigenfunción de los operadores $L_{x_{op}}$ o $L_{y_{op}}$, las cantidades dinámicas correspondientes L_x y L_y no tienen valores precisos en el átomo con un electrón. Esto es, L_x y L_y no obedecen las condiciones de cuantización.

PREGUNTAS

1. Si un átomo de hidrógeno no estuviera en reposo, sino moviéndose libremente por el espacio, ¿cómo tendría que modificarse la descripción cuántica del átomo?.

2. ¿Por que, si es bien conocido que el potencial de Coulomb tiene una forma muy simple en coordenadas polares esféricas, se inició el tratamiento del átomo con un electrón en coordenadas cartesianas?

3. ¿Cuáles son las ecuaciones importantes de la física clásica en las que interviene el operador Laplaciano?

4. Si se toman formas diferentes de las constantes de separación que resultan al reducir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para el átomo con un electrón, a tres ecuaciones diferenciales ordinarias, ¿se afectarían los resultados?

5. ¿Por qué la función $\Phi(\varphi)$ debe ser monovaluada? ¿Cómo es que lo anterior conduce a que m_l esté restringido a ser un número entero?

6. ¿Qué pasaría si se tomara $e^{-im_l\varphi}$ como la solución particular de la ecuación para $\Phi(\varphi)$? ¿Qué sucedería con $\cos m_l\varphi$ o $\operatorname{sen} m_l\varphi$?

7. ¿Por qué aparecen tres números cuánticos en el tratamiento del átomo con un electrón (sin spin)?

8. ¿Podría describir la forma de $\Theta(\theta)$ y $\Phi(\varphi)$ si V fuera una función de r diferente de $1/r$? (Este es el caso para el electrón de valencia en un átomo alcalino).

9. Simplemente, ¿qué es degeneración?

10. ¿Qué relación existe entre el tamaño de un átomo de Bohr y el tamaño de un átomo de Schrödinger?

11. ¿Cuál es la razón fundamental para que el tamaño del átomo de hidrógeno, en el estado base, tenga el valor que tiene?

12. Para el átomo con un electrón en el espacio libre, ¿Cuál sería la consecuencia matemática de escoger la dirección del eje z de otro modo? ¿Qué consecuencias físicas?

13. ¿Por qué un campo eléctrico o magnético uniforme define sólo una dirección única en el espacio?

14. Los tratamientos de Bohr y Schrödinger para el átomo de hidrógeno (sin tomar en cuenta el spin y otros efectos relativistas), ¿cómo se comparan sus respectivas predicciones respecto a la posición del electrón, su energía total, y su impulso angular orbital?

15. Encuentre una explicación para la obvia relación entre los dos últimos términos del operador Laplaciano, en coordenadas polares esféricas, y el operador para el cuadrado de la magnitud del impulso angular orbital.

16. Usando la relación entre L y l, explique físicamente por qué $\psi^*\psi$ es muy pequeña cerca de $r=0$, a menos que $l=0$.

17. Diga exactamente por qué se dice que el átomo de hidrógeno en el espacio libre posee un vector de impulso angular orbital que precede arbitrariamente en torno al eje z (sin tomar en cuenta el spin).

18. ¿Cuál es la ley de conservación del impulso angular orbital en mecánica cuántica?

19. ¿Son las eigenfunciones de magnitud igual a la del impulso angular necesariamente eigenfunciones de la energía total? ¿Es correcta la afirmación recíproca?

20. ¿Se pueden encontrar ejemplos de ecuaciones de eigenvalores en la física clásica? Si así es, ¿cuáles son?

PROBLEMAS

1. Usando la técnica de separación de variables, demuestre que existen soluciones a la ecuación de Schrodinger tridimensional para un potencial independiente del tiempo, que se pueden escribir,

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}$$

donde $\psi(x,y,z)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

2. Verificar que $\Phi(\varphi) = e^{im_l\varphi}$ es la solución a la ecuación para $\Phi(\varphi)$, (7-15).

3. Hidrógeno, deuterio, y helio ionizado son ejemplos de átomos con un electrón. El núcleo de deuterio tiene la misma carga que el núcleo de hidrógeno y casi exactamente el doble de la masa. El núcleo de helio tiene el doble de la carga del núcleo de hidrógeno y casi exactamente cuatro veces su masa. Predecir con precisión las razones de las energías de los estados base de estos átomos. Sugerencia: recuerde la variación en la masa reducida).

4. (a) Evaluar, en electrónvolts, las energías de los tres niveles del átomo de hidrógeno en los estados correspondientes a $n=1,2,3$. (b) Calcular las frecuencias en Hertz y las longitudes de onda en angstroms, de los fotones que pueden ser emitidos por el átomo en transiciones entre estos niveles. (c) ¿En qué intervalo del espectro electromagnético están estos fotones?

5. Verifique por sustitución que la eigenfunción del estado base ψ_{100}, y el eigenvalor del estado base E, satisfacen la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para el átomo de hidrógeno.

6. (a) Extender el ejemplo 7-4 para obtener del principio de incertidumbre una predicción de la energía del estado base del átomo de hidrógeno. (b) Compare el resultado anterior con la energía predicha por la ecuación (7-22).

7. a) Calcular la posición a la cual la densidad de probabilidad radial es máxima para el estado $n=2$, $l=1$, del átomo de hidrógeno. (b) Después, calcular el valor de expectación de la coordenada radial en dicho estado. (c) Explicar el significado físico de la diferencia entre las respuestas a (a) y (b). (Sugerencia: ver la figura 7-5).

8. **a)** Calcular el valor de expectación de $\bar{V}$ para la energía del estado base del átomo de hidrógeno. (b) Demostrar que en el estado base $E = \bar{V}/2$, donde E es la energía total. (c) Usar la relación $E=K+V$

para calcular el valor de expectación $\bar{K}$ de la energía cinética en el estado base y demostrar que $\bar{K} = -\bar{V}/2$. Estas relaciones se obtienen para cualquier estado de movimiento de cualquier sistema mecánico-cuántico (o clásico) con un potencial de la forma $V(r) \propto -1/r$. Algunas veces a estas relaciones se les llama *teorema virial.*

9. (a) Calcular el valor de expectación $\bar{V}$ de la energía potencial en el estado $n = 2$, $l = 1$, del átomo de hidrógeno. (b) Hacer lo mismo para el estado $n = 2$, $l = 0$. (c) Analizar los resultados de (a) y (b), en relación con el teorema virial del problema 8 y explicar qué papel tiene en el origen de la degeneración l.

10. Sustituyendo $R(r) \propto r^l$, en la ecuación (7-17) para $R(r)$, demostrar que es una solución para $r \to 0$. Sugerencia: Ignore los términos que se vuelven muy pequeños respecto a los demás cuando $r \to 0$.)

11. Demostrar que la suma de las densidades de probabilidad para los estados cuánticos $n = 3$ del átomo de hidrógeno, es esféricamente simétrica, análoga a la suma en el ejemplo 7-5.

12. Demuestre que $\Phi(\varphi) = \cos m_l\varphi$, y $\Phi(\varphi) = \operatorname{sen} m_l\varphi$, son soluciones particulares a la ecuación (7-15) para $\Phi(\varphi)$.

13. Usando las técnicas del apéndice I demostrar que $L_{x_{op}}$ tiene la forma que se afirma en (7-37).

14. Probar que $L^2_{op}\psi_{nlm_l} = l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm_l}$. (Sugerencia: utilice la ecuación diferencial que satisface $\Theta_{lm_l}(\theta)$, (7-16).

15. Se sabe que $\psi = e^{ikx}$ es una eigenfunción del operador de energía total e_{op} para el problema unidimensional de potencial cero. (a) Demuestre que también es una eigenfunción del operador impulso lineal p_{op} y determine el eigenvalor asociado. (b) Repita lo anterior para $\psi = e^{-ikx}$ (c) Interprete los resultados de (a) y (b) en relación a medida del impulso lineal. (d) También se sabe que $\psi = \cos kx$ y $\psi = \operatorname{sen} kx$ son eigenfunciones del potencial cero e_{op}. ¿Son también eigenfunciones de p_{op}? (e) Interprete los resultados de (d).

16. Las cuatro funciones $e^{im_l\varphi}$, $e^{-im_l\varphi}$, $\cos m_l\varphi$, y $\operatorname{sen} m_l\varphi$, son soluciones particulares de (7-15), para $\Phi(\varphi)$, (ver el problema 12). (a) Encontrar también cuáles son eigenfunciones del operador $L_{z_{op}}$ de la componente z del impulso angular. (b) Interprete los resultados.

17. Una partícula de masa μ se encuentra fija en un extremo de una barra rígida de masa despreciable y longitud R. El otro extremo de la barra gira en el plano x-y, en torno a una bola de acero que se encuentra en el origen, y cuyo eje está en la dirección z. Este "rotor rígido" tridimensional se ilustra en la figura 7-13. (a) Encuentre una expresión para la energía total del sistema en términos del impulso angular L. (Sugerencia: hacer la energía potencial constante igual a cero y expresar la energía cinética en términos de L). (b) Introduciendo los operadores apropiados en la ecuación de la energía, conviértala en la ecuación de Schrödinger,

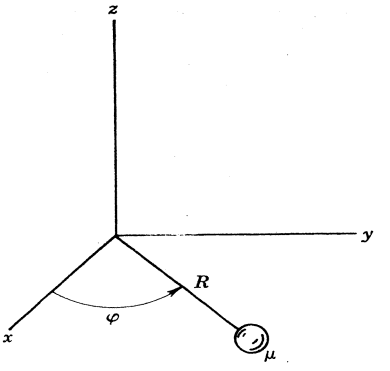


FIGURA 7-13
El rotor rígido moviéndose en el plano x-y, considerado en el problema 17.

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\Psi(\varphi, t)}{\partial\varphi^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi(\varphi, t)}{\partial t}$$

donde $I = \mu R^2$ es la inercia rotacional, o momento de inercia, y $\Psi(\varphi, t)$ es la función de onda escrita en términos de la coordenada angular y el tiempo t. (Sugerencia: como el impulso angular está completamente en la dirección z, $L = L_z$ y el operador correspondiente es $L_{z_{op}} = -i\hbar\partial/\partial\varphi$).

18. Aplicando la técnica de separación de variables divida la ecuación de Schrödinger para el rotor rígido del problema 17, para obtener: (a) la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = E\Phi(\varphi)$$

y (b) la ecuación para la dependencia con el tiempo de la función de onda

$$\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}T(t)$$

En estas ecuaciones E = la constante de separación, y $\Phi(\varphi)T(t) = \Psi(\varphi, t)$, es la función de onda.

19. (a) Resuelva la ecuación para la dependencia con respecto al tiempo de la función de onda obtenida en el problema 18. (b) Demostrar que la constante de separación E es la energía total.

20. Demostrar que la solución particular para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el rotor rígido del problema 18 es $\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$ donde $m = \sqrt{2IE}/\hbar$.

21. (a) Aplicar la condición de unicidad a la solución particular del problema 20. Demostrar después que los valores permitidos de la energía total E para el rotor rígido bidimensional mecánico-cuántico son

$$E = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} \qquad |m| = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

(c) Comparar los resultados de la mecánica cuántica con los de la mecánica cuántica antigua obtenidos en el problema 34 del capítulo 4. (d) Explicar por qué el rotor rígido mecánico-cuántico bidimensional no posee energía de punto cero. Explicar también por qué no es del todo, un modelo realista para un sistema microscópico.

22. Normalizar las funciones $\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$ encontradas en el problema 21.

23. (a) Calcular el valor de expectación del impulso angular, $\overline{L}$, para un rotor rígido bidimensional en un estado cuántico típico, usando las eigenfunciones encontradas en el problema 22. (b) Después calcular $\overline{L^2}$ y $\overline{L}^2$, e interpretar la relación entre estos resultados y los valores de L que se obtendrían en una serie de medidas sobre el sistema.

8

Momentos magnéticos dipolares, spin y razones de transición

8.1 Introducción 317

Relación entre el momento dipolar magnético y el impulso angular; justificación para usar parcialmente procedimientos clásicos.

8.2 Momentos dipolares magnéticos orbitales 317

Momento dipolar magnético e impulso angular de electrones orbitales; magnetón de Bohr; factor g orbital; precesión de Larmor; dipolo magnético en un campo magnético uniforme; efectos de un campo magnético no uniforme.

8.3 Experimento de Stern-Gerlach y spin del electrón 322

Aparato; cuantización espacial; concordancia cualitativa y no concordancia cuantitativa con las predicciones de Schrödinger; experimentos de Phipps-Taylor; spin; números cuánticos s y m_s; impulso angular de spin; momento dipolar magnético y factor g; efecto Zeeman; spin y extructura fina; carácter no-clásico del spin; teoría relativista de Dirac.

8.4 Interacción spin-órbita 328

Campo magnético interno en el átomo con un electrón; energía debida a la orientación del momento dipolar magnético de spin; procesión de Thomas; energía de interacción spin-órbita.

8.5 Impulso angular total 331

Acoplamiento entre los impulsos angulares orbital y de spin; comportamiento del impulso angular total; condiciones que satisfacen los números cuánticos j y m_j.

8.6 Energía de interacción spin-órbita y niveles de energía del hidrógeno **335**

Expresiones convenientes para la energía de interacción spin-orbital; aplicación al átomo de hidrógeno; otros efectos relativistas; constante de estructura fina; comparación de los resultados de Dirac, Sommerfeld y Bohr; corrimiento Lamb; estructura hiperfina.

8.7 Razones de transición y reglas de selección **340**

Reglas de selección para el átomo con un electrón; falla de la teoría cuántica antigua al explicar las razones de transición; relación entre las razones de transición y las reglas de selección; momento dipolar eléctrico oscilante en una mezcla de estados cuánticos-radiación de un dipolo eléctrico oscilante; evaluación de la razón de transición; elemento de matriz del dipolo eléctrico; descripción según la electrodinámica cuántica de las emisiones estimulada y espontánea; relación entre las reglas de selección y los elementos de matriz; evaluación de la regla de selección para m_l; reglas de selección y simetrías físicas o matemáticas; dependencia en l de la paridad de las eigenfunciones para potenciales esféricamente simétricos; violaciones a las reglas de selección; estados metaestables.

8.8 Comparación entre las teorías cuánticas antigua y moderna **347**

Superioridad de las teorías modernas.

Preguntas **348**

Problemas **349**

8

Momentos magnéticos dipolares, spin y razones de transición

8.1 Introducción

En este capítulo se prosigue el estudio del átomo con un electrón. Primero se estudiarán los experimentos que miden el impulso angular orbita L de un electrón en un átomo. En estos experimentos no se mide realmente L sino una cantidad relacionada, a saber, el momento magnético dipolar orbital μ_l, La manera de medirlo es mediante su interacción con un campo magnético aplicado al átomo. Además de desarrollar la relación entre μ_l y L que es el fundamento teórico para estas mediciones también se recordarán algunas de las propiedades de la interacción entre un dipolo magnético y un campo magnético que se utilizan tanto en estas mediciones como en otras de física atómica, física nuclear y estado sólido.

Al considerar los resultados de las mediciones de los momentos magnéticos dipolares atómicos se descubrirá el hecho muy importante de que los electrones poseen un impulso angular intrínseco llamado spin y un momento magnético dipolar asociado a éste. Entonces se verá el efecto que el spin del electrón tiene sobre los niveles de energía de un átomo monoelectrónico. Por último, se desarrollará un procedimiento para calcular la razón a la cual los átomos monoelectrónicos excitados realizan transiciones a estados más bajos y emiten los fotones que forman sus espectros.

En los desarrollos presentados en este capítulo se utilizará una combinación de teoría electromagnética simple, algunos modelos de la física clásica como el de Bohr y mecánica cuántica. No se presentarán tratamientos totalmente mecánico-cuánticos debido a que requieren un conocimiento más avanzado de la teoría electromagnética del que se ha supuesto para este libro. Este procedimiento se justifica por el hecho de que los resultados concuerdan con los que se obtienen mediante tratamientos formales. Desde luego, se dispone de esta justificación gracias a que alguien se tomó la molestia de desarrollar todo esto formalmente.

8.2 Momentos magnéticos dipolares orbitales

Considérese un electrón de masa m y carga $-e$ que se mueve en una órbita de Bohr circular de radio r y con velocidad de magnitud v, tal y como se muestra en la figura 8-1. (Puesto que convencionalmente se usa μ para el momento magnético dipolar aquí no se usará esta letra para la masa reducida del electrón. No puede haber confusión ya que por lo general la precisión en los experimentos y en los cálculos no obligan a establecer diferencias entre la masa reducida del electrón y la masa m del mismo). La carga que circula en una espira constituye una corriente de magnitud:

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r} \tag{8-1}$$

donde T es el período orbital del electrón cuya carga tiene magnitud e. En la teoría electromagnética elemental se demuestra que una espira de corriente como ésta produce un campo magnético que para distancias grandes es el mismo que el de un dipolo magnético localizado en el centro de la espira y orientado perpendicularmente al plano de ella. Para una corriente i en una espira de área A la magnitud del *momento magnético dipolar orbital* μ_l del dipolo equivalente es

$$\mu_l = iA \tag{8-2}$$

y la dirección del momento magnético dipolar es perpendicular al plano de la órbita y con el sentido que se indica en la figura 8-1 que muestra el campo magnético producido por la espira de corriente, así como dos polos ficticios de un dipolo que produciría un campo magnético que sería idéntico al campo real para puntos lejanos a la espira. La cantidad μ_l especifica la intensidad de este dipolo magnético que es igual al producto de la intensidad de los polos por la separación entre ellos. Debido a que el electrón tiene carga negativa, su momento magnético dipolar μ_l es antiparalelo a su momento angular orbital L cuya magnitud está dada por

$$L = mvr \tag{8-3}$$

y cuya dirección se indica en la figura 8-1

Tomando i de (8-1) y A para una órbita de Bohr circular, (8-2) conduce a

$$\mu_l = iA = \frac{ev}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{evr}{2} \tag{8-4}$$

Dividiendo entre (8-3) se obtiene

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{evr}{2mvr} = \frac{e}{2m} \tag{8-5}$$

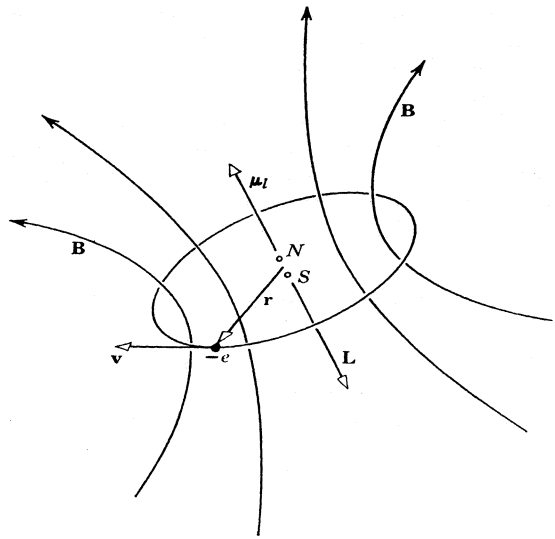


FIGURA 8-1
El impulso angular orbital **L** y el momento magnético dipolar orbital μ_l de un electrón $-e$ que se mueve en una órbita de Bohr. Las líneas curvadas indican el campo magnético **B** producido por la carga circulante. El dipolo magnético ficticio que produciría un campo idéntico lejos de la espira está indicado por sus polos N, S.

Se observa que la relación de la magnitud μ_l del momento magnético dipolar orbital a la magnitud de L del momento angular orbital para el electrón es una combinación de constantes universales. Se acostumbra escribir esta relación como

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \tag{8-6}$$

donde

$$\mu_b = \frac{e\hbar}{2m} = 0.927 \times 10^{-23} \text{ A -m}^2 \tag{8-7}$$

y

$$g_l = 1 \tag{8-8}$$

La cantidad μ_b es una unidad natural para la medida de momentos magnéticos dipolares atómicos y se la denomina *magnetón de Bohr*. A la cantidad g_l se le llama *factor orbital g*. Este factor se introduce, aunque aquí puedá parecer redundante, para preservar la simetría de las ecuaciones en las que aparecen factores g distintos de 1 y que se tratarán posteriormente. Es posible escribir la ecuación (8-5) como una ecuación vectorial en términos de estas cantidades y especificando tanto la magnitud de $\boldsymbol{\mu}_l$ como su orientación en relación con $\mathbf{L}$. Esto es

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} \mathbf{L} \tag{8-9}$$

La relación de μ_l a L no depende del tamaño de la órbita ni de la frecuencia orbital. Se puede demostrar mediante un cálculo similar al anterior que para el caso de una órbita elíptica la relación μ_l/L es independiente de la forma de la órbita. El que esta relación sea completamente independiente de los detalles de la órbita sugiere que su valor no debe depender de los detalles de la teoría mecánica utilizada para evaluarla y esto es realmente lo que sucede. De una evaluación de μ_l por medio de mecánica cuántica (lo cual no es posible hacer aquí debido a que la teoría electromagnética requerida es muy sofisticada) y dividiendo por la expresión cuántica $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, se encuentra que la relación de μ_l a L tiene el mismo valor que el que se obtuvo antes. Concediendo esto, el estudiante aceptará que las expresiones cuánticas correctas para la magnitud y componente z del momento magnético dipolar orbital son

$$\mu_l = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} L = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \sqrt{l(l+1)}\,\hbar = g_l \mu_b \sqrt{l(l+1)} \tag{8-10}$$

y

$$\mu_{l_z} = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} L_z = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} m_l \hbar = -g_l \mu_b m_l \tag{8-11}$$

El signo menos en esta última ecuación refleja el hecho de que el vector $\boldsymbol{\mu}_l$ es antiparalelo al vector $\mathbf{L}$.

Ahora se recordará el comportamiento de un dipolo magnético de momento $\boldsymbol{\mu}_l$ cuando se lo coloca en un campo magnético aplicado $\mathbf{B}$. En la teoría electromegnética elemental se demuestra que el dipolo experimenta un impulso relativo:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}_l \times \mathbf{B} \tag{8-12}$$

que tiende a alinearlo con el campo y que asociada a este impulso relativo existe una energía potencial de orientación

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{B} \tag{8-13}$$

Ejemplo 8-1 Suponga que un dipolo magnético cuyo momento tiene magnitud μ_l, está alineado en forma paralela a un campo magnético externo de intensidad B. Tómese $\mu_l = 1$ magnetón de Bohr (valor típico para el momento magnético dipolar de un átomo) y $B = 1$ Tesla (valor típico del campo producido por un electroimán de potencia mediana). Calcular la energía necesaria para girar el dipolo magnético de manera que quede alineado antiparalelo al campo.

De acuerdo con (8-13) la energía potencial de orientación cuando el dipolo está paralelo al campo es $-\mu_l B$, y cuando el dipolo está antiparalelo al campo es $+\mu_l B$. Entonces la energía que deberá suministrarse para girar el dipolo es

$$2\mu_l B = 2 \times 0.927 \times 10^{-23}\ \text{A-m}^2 \times 1\ \text{joule/A-m}^2$$
$$= 1.85 \times 10^{-23}\ \text{joule} = 1.16 \times 10^{-4}\ \text{eV}$$

No obstante que esta energía es muy pequeña, aún para las normas atómicas, no es posible girar el dipolo a menos que se le suministre energía. Recíprocamente, si el dipolo se encuentra originalmente alineado antiparalelo al campo, no podrá girarse para ponerlo paralelo a él a menos que el dipolo ceda la misma cantidad de energía. ◀

Si para un sistema consistente de un momento magnético dipolar $\boldsymbol{\mu}_l$ en un campo magnético $\mathbf{B}$ no existe modo de disipar la energía, entonces la energía potencial de orientación ΔE deberá permanecer constante. En estas circunstancias $\boldsymbol{\mu}_l$ no se puede alinear por si mismo con $\mathbf{B}$ y entonces precede alrededor de $\mathbf{B}$ de tal manera que el ángulo entre estos dos vectores y sus magnitudes permanecen constantes. El movimiento de precesión es una consecuencia del hecho de que, según las ecuaciones (8-9) y (8-12), el impulso rotativo que actúa sobre el dipolo siempre es perpendicular a su impulso angular, en completa analogía con el caso del tiempo. La precesión y su explicación están ilustradas en la figura 8-2. Es fácil demostrar (véase el pie de figura) que la magnitud de la frecuencia angular de precesión de $\boldsymbol{\mu}_l$ alrededor de $\mathbf{B}$ está dada por

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \mathbf{B} \tag{8-14}$$

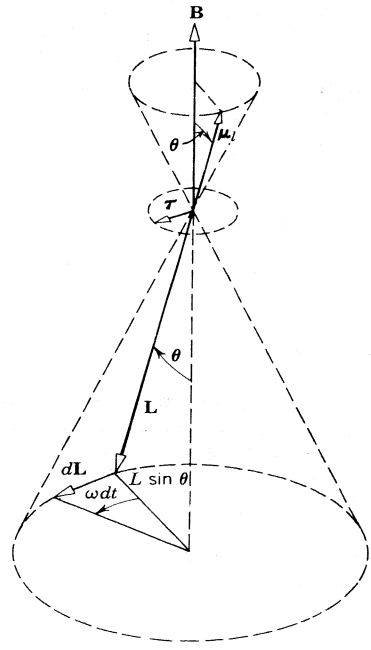
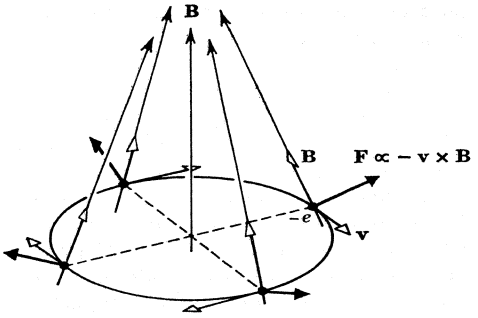


FIGURA 8-2
Al interactuar el momento magnético dipolar $\boldsymbol{\mu}_l$ del átomo con el campo aplicado $\mathbf{B}$ se tiene impulso rotativo $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}_l \times \mathbf{B} = -(g_l \mu_b/\hbar)$ Este impulso rotativo origina un cambio $d\mathbf{L}$ en el impulso angular durante un tiempo dt, según la ley de Newton $d\mathbf{L}/dt = \boldsymbol{\tau}$. El cambio $d\mathbf{L}$ causa que $\mathbf{L}$ preceda por un ángulo $\omega\, dt$, donde ω es la velocidad angular de precesión. Del diagrama se ve que $dL = L$ sen $\theta\omega\, dt$, ó $L\omega$ sen $\theta = dL/dt = \tau = (g_l \mu_b/\hbar)LB$ sen θ. Así $\omega = g_l \mu_b B/\hbar$, como en (8-14).

FIGURA 8-3
Un electrón se mueve en una órbita de Bohr con velocidad **v**, el campo aplicado en esta región es convergente (**B**), el campo ejerce una fuerza **F** sobre el electrón. Debido a que la carga del electrón es negativa, $\mathbf{F} \propto -\mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Sin importar la posición del electrón en la órbita, esta fuerza tiene una componente que es radialmente hacia afuera y una componente a lo largo de la dirección en la cual **B** se hace más intensa. Promediando sobre la órbita, la componente radial se cancela y la fuerza promedio está en la dirección en la que crece **B**.



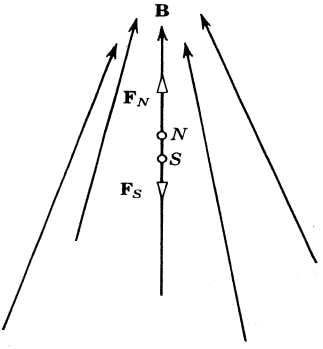
Esta ecuación también indica que el sentido de precesión es en la dirección de **B**. Al fenómeno se le conoce como *precesión de Larmor* y a $\boldsymbol{\omega}$ se le denomina *frecuencia de Larmor.*

La ecuación (8-14) se obtuvo de tratamientos clásicos, pero un tratamiento cuántico conduce al mismo resultado en el sentido de que los valores esperados de las componentes perpendiculares al campo magnético de un momento magnético dipolar cuántico cambia en el tiempo en forma cíclica, de la misma manera que lo hacen las componentes perpe..diculares al campo magnético de un momento magnético dipolar clásico. Con objeto de simplificar el análisis en las secciones siguientes, se hablará frecuentemente de la precesión de un momento magnético dipolar cuántico en un campo magnético, aunque para ser estrictamente correctos se debería hablar del cambio cíclico en los valores de expectación de sus componentes perpendiculares.

Si el campo magnético aplicado es uniforme en el espacio, no habrá sobre el dipolo fuerza neta de *traslación* (aunque evidentemente existirá un impulso rotativo). Pero si el campo no es uniforme, existirá además del impulso rotativo una fuerza de traslación. En la figura 8-3 se muestra lo que sucede realmente, es decir, que un electrón que se mueve con velocidad **v** en una órbita circular en una región en la cual el campo **B** converge siente una fuerza proporcional a $-\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ que tiene siempre una componente en la dirección en la cual el campo se hace más intenso. También se puede ver el efecto mediante la analogía entre un dipolo magnético ficticio en un campo magnético no uniforme y un dipolo eléctrico en un campo eléctrico no uniforme. Véase figura 8-4. Usando esta analogía es fácil demostrar que la fuerza promedio que actúa sobre el dipolo magnético es

$$\overline{F_z} = \frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_{l_z} \tag{8-15}$$

FIGURA 8-4
Ilustración de las fuerzas $\mathbf{F}_N$ y $\mathbf{F}_S$ que actúan sobre los polos de un dipolo magnético ficticio equivalente al electrón circulante de la figura 8-3 y que se localiza en una región en la que el campo aplicado **B** converge. Puesto que $\mathbf{F}_N$ es mayor en magnitud que $\mathbf{F}_S$, la fuerza neta sobre el dipolo está en la dirección en la cual **B** se hace más intensa. Esta situación resultará familiar al estudiante en el caso en el cual el campo y el momento dipolar son eléctricos en vez de magnéticos.



donde z es el eje coordenado en la dirección en la que crece la intensidad del campo y $\partial B_z/\partial z$ es la razón a la cual aumenta. Se concluye que un dipolo magnético en un campo magnético no uniforme experimenta un impulso rotativo que causa precesión y una fuerza que origina desplazamiento.

8.3 Experimento de Stern-Gerlach y spin del electrón

En 1922 Stern y Gerlach midieron los valores posibles del momento magnético dipolar para átomos de plata enviando un haz de ellos a través de un campo magnético no uniforme. En la figura 8-5 se presenta un diagrama del aparato que utilizaron. Mediante la evaporación de plata en un horno se forma un haz de átomos neutros el cual se colima con un diafragma para que de esta manera, penetre al imán. La vista transversal del imán muestra que esto produce un campo que aumenta en intensidad en la dirección z definida en la figura y que, a su vez, es la dirección del campo magnético mismo en la región del haz. Como los átomos son neutros, la única fuerza neta que actúa sobre ellos es la fuerza $\overline{F_z}$ de (8-15) que es proporcional a μ_{l_z}. Puesto que la fuerza que actúa sobre cada uno de los átomos del haz es proporcional a su valor de μ_{l_z}, cada átomo al pasar por el campo magnético es deflectado por una cantidad que es proporcional a μ_{l_z}. Entonces, el haz se ***analiza*** en componentes según los distintos valores de μ_{l_z}. Los átomos deflectados golpean sobre una placa metálica sobre la cual se condensan y dejan una traza visible.

Si el vector de momento magnético orbital del átomo tiene magnitud μ_l, entonces, según la física clásica, la componente z (μ_{l_z}) puede tener *cualquier* valor desde $-\mu_l$ hasta $+\mu_l$. La razón es que clásicamente el átomo puede tener cualquier orientación con relación al eje z, lo cual también será cierto para su impulso angular orbital y su momento magnético dipolar. Las predicciones de la mecánica cuántica, que se resumen en (8-11), son que μ_{l_z} sólo puede tener los valores *discretos cuantizados*

$$\mu_{l_z} = -g_l \mu_b m_l \tag{8-16a}$$

donde m_l es uno de los enteros

$$m_l = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, +l-1, +l \tag{8-16b}$$

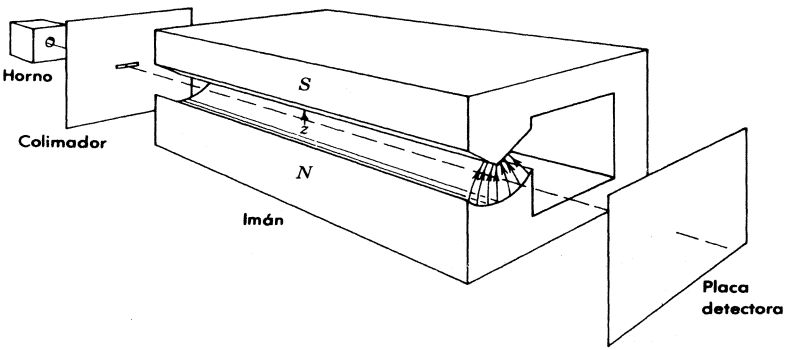


FIGURA 8-5
Aparato de Stern-Gerlach. El campo entre las dos piezas polares está indicado por las líneas de campo dibujadas en el extremo del imán. La intensidad del campo aumenta en la dirección positiva de la z (hacia arriba).

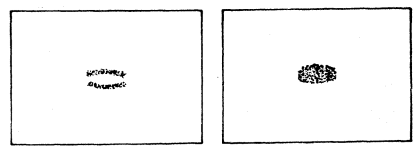
La predicción clásica es que el haz deflectado debería extenderse en una banda continua correspondiendo a una distribución continua de valores de μ_{l_z} debida a todos los átomos. La predicción de la mecánica cuántica es que el haz deflectado debería desdoblarse en varias componentes discretas. Además, la mecánica cuántica predice que esto debería suceder para todas las orientaciones del imán analizador. Esto es, fundamentalmente el imán actúa como un dispositivo de medición que sirve para investigar la cuantización de las componentes del momento magnético dipolar a lo largo del eje z, la cual está definida por la dirección en la cual crece la intensidad del campo. Puesto que según la mecánica cuántica μ_{l_z} debería estar cuantizada para cualquier elección de la dirección z ya que L_z lo está, se deberían obtener los mismos resultados para todas las posiciones del imán analizador.

Stern y Gerlach encontraron que el haz de átomos de plata se desdoblaba en dos componentes discretas, una componente se doblaba hacia la dirección positiva del eje z y la otra en la dirección opuesta, el tipo de patrones observados en la placa detectora se muestran en la figura 8-6. También encontraron que se obtenían estos mismos resultados independientemente de la elección que se hiciera para el eje z. El experimento se repitió utilizando otras especies de átomos y en cada caso investigado se encontró que el átomo deflectado se desdoblaba en dos o mas componentes discretas. *Cuantitativamente* estos resultados son una prueba experimental muy directa de la cuantización de la componente z de los momentos magnéticos dipolares de los átomos y, por lo tanto, de sus impulsos angulares. En otras palabras, los experimentos demuestran que la orientación de los átomos en el espacio está cuantizada. Al fenómeno se le llama *cuantización espacial.*

Pero los resultados del experimento de Stern-Gerlach no concuerdan *cuantitativamente* con las ecuaciones (8-16a) y (8-16b) que son las que resumen las predicciones de la teoría expuesta en este libro. Según estas ecuaciones, el número de valores posibles de μ_{l_z} es igual al número de valores posibles de m_l, es decir, $2l + 1$. Y puesto que l es un entero, este número siempre debería ser impar, además para cualquier valor de l uno de los valores posibles de m_l es cero. Por lo tanto, el hecho de que el haz de átomos de plata se desdoble sólo en dos componentes y ambas se deflecten, indica una de dos cosas; o que algo está mal en la teoría de Schrödinger del átomo, o que la teoría es incompleta.

La teoría atómica de Schrödinger no es incorrecta; pero tal como se ha presentado está *incompleta* (como se verá posteriormente los átomos tienen impulso angular orbital y el momento magnético dipolar con las propiedades predichas). Esto se demostró más claramente por el experimento de Phipps y Taylor (1927) quienes usaron la técnica de Stern-Gerlach con átomos de hidrógeno. Este experimento es particularmente interesante debido a que estos átomos tienen un solo electrón, de tal manera que la teoría que se ha presentado aquí hace predicciones precisas para este caso. Como los átomos del haz están en su estado base debido a la temperatura relativamente baja del horno, la teoría predice que el número cuántico l tiene el valor $l = 0$. Entonces, sólo existe un valor posible para m_l, a saber; $m_l = 0$, y es de esperarse que el haz no sea deflectado por el campo magnético ya que μ_{l_z} es igual a cero. Sin embargo,

FIGURA 8-6
Patrón de deflexión registrado sobre la placa en un experimento Stern-Gerlach de la componente z del momento magnético dipolar de átomos de plata. La deflexión máxima se presenta en el centro del haz debido a que en esta región los átomos pasan a través del máximo gradiente de campo $\partial B_z/\partial z$. El patrón observado consiste de dos componentes discretas debido a la cuantización espacial. Según la predicción clásica se esperaría una banda continua.



Phipps y Taylor encontraron que el haz se desdobla en dos componentes que se deflectan simétricamente; por lo tanto, efectivamente existe algún momento magnético dipolar en el átomo que no ha sido considerado hasta ahora.

Una posibilidad es un momento magnético dipolar asociado con el movimiento de cargas en el núcleo y cuya magnitud debería de ser del orden de $e\hbar/2M$, donde M es la masa del protón. Pero el momento magnético dipolar medido experimentalmente a partir de la magnitud del desdoblamiento es del orden de $\mu_b = e\hbar/2m$, donde m es la masa de un electrón, es decir es aproximadamente 2000 veces mayor. Por lo tanto, el núcleo no puede ser el causante del momento magnético dipolar observado y su origen debería estar en el electrón.

Estos conduce a algunas suposiciones razonables, las cuales también serán reforzadas por otras evidencias que se estudiarán en breve. Se supone que un electrón tiene un momento magnético dipolar μ_s, intrínseco (integrante) debido al hecho de que tiene un impulso angular intrínseco S llamado *spin*. Desde un punto de vista clásico se puede pensar, al menos a grosso modo, que el electrón produce el campo magnético externo de un dipolo magnético debido a las espiras de corriente asociadas con la rotación de su carga. También se supone que la magnitud (S) y la componente z (S_z) del *impulso angular de spin* están relacionadas con dos números cuánticos, s y m_s, mediante relaciones de cuantización que son idénticas a las del impulso angular orbital. Esto es

$$S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar \tag{8-17}$$

$$S_z = m_s\hbar \tag{8-18}$$

(Obsérvese que S_x y S_y no están cuantizadas, también ocurre para el caso de L_x y L_y). Además, se supone que la relación entre el *momento magnético dipolar de spin* y el impulso angular de spin es de la misma forma que la relación para el caso orbital. Esto es

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{g_s\mu_b}{\hbar}\,\mathbf{S} \tag{8-19}$$

$$\mu_{s_z} = -g_s\mu_b m_s \tag{8-20}$$

A la cantidad g_s se le llama el *factor g de spin*.

De la observación experimental que el haz de átomos de hidrógeno se desdobla en dos componentes deflectadas simétricamente, resulta evidente que μ_{s_z} sólo puede tomar dos valores, los cuales son iguales en magnitud pero opuestos en signo. Por último, si se supone que los valores posibles de m_s difieren en uno y van de $-s$ a $+s$ como en el caso de los números cuánticos m_l y l para el impulso angular orbital, se concluye que los dos valores posibles de m_s son

$$m_s = -1/2,\ +1/2 \tag{8-21}$$

y que s tiene el valor

$$s = 1/2 \tag{8-22}$$

Midiendo el desdoblamiento del haz de átomos de hidrógeno es posible evaluar la fuerza neta F_z que éstos sienten en su viaje por el campo magnético. Por analogía con (8-15) y (8-20) esta fuerza es $F_z = -(\partial B_z/\partial z)\mu_b g_s m_s$. Puesto que μ_b se conoce y $\partial B_z/\partial z$ se puede medir, los experimentos determinan el valor de $g_s m_s$. Dentro de la precisión experimental se ha encontrado que $g_s m_s = \pm 1$. de lo cual se concluye que $m_s = \pm 1/2$, y por lo tanto

$$g_s = 2 \tag{8-23}$$

Estas conclusiones se confirman mediante muchos experimentos. Por ejemplo, en el *efecto Zeeman* se aplica externamente un campo magnético uniforme a una colección de átomos y se

miden las energías potenciales de orientación de los momentos magnéticos dipolares de los átomos respecto al campo. Como se estudiará en detalle en el capítulo 10, esto se hace mediante la medición del desdoblamiento de las líneas espectrales emitidas cuando los átomos decaen de algún nivel de energía mayor al nivel de energía de su estado base. El desdoblamiento de la línea ocurre debido a que los niveles mismos se desdoblan según los diferentes valores de la energía potencial de los átomos. Un ejemplo sencillo es el del efecto Zeeman para los átomos de hidrógeno. En su estado base los átomos no tienen impulso angular orbital y, por lo tanto, no tienen momentos magnéticos dipolares orbitales. Pero las medidas muestran que su nivel de energía del estado base se desdobla en dos componentes cuando se le aplica un campo magnético, estas componentes aparecen simétricamente dispuestas alrededor de la posición que guardaba el estado base en ausencia del campo. Este desdoblamiento refleja los dos valores posibles de la energía potencial de orientación.

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -\mu_{s_z} B \\ &= g_s \mu_b m_s B \\ &= \pm g_s \mu_b B/2\end{aligned}$$

donde se ha escogido al eje z como la dirección del campo aplicado. El hecho de que el nivel se desdoble simétricamente en dos componentes confirma la conclusión de que $m_s = \pm 1/2$, y la medida de la magnitud del desdoblamiento confirma la conclusión de que $g_s = 2$.

Medidas espectroscópicas recientes hechas por Lamb en las que usó una técnica de extremada precisión han mostrado que $g_s = 2.00232$. Sin embargo, en casi todas las situaciones resulta bastante adecuado decir simplemente que el factor de spin g para un electrón es dos veces más grande que su factor orbital g; es decir, que el momento magnético dipolar de spin es *dos veces mayor* que el impulso angular de spin de manera similar a la comparación que se hace entre el momento magnético dipolar orbital y el impulso angular orbital. Por otra parte, $\boldsymbol{\mu}_s$ y $\mathbf{S}$ son antiparalelos, al igual que $\boldsymbol{\mu}_l$ y $\mathbf{L}$, debido a que la orientación relativa de cualesquiera par de vectores sólo depende del hecho de que el electrón tiene carga negativa.

Ejemplo 8-2 Se hace pasar un haz de átomos de hidrógeno provenientes de un horno que trabaja a una temperatura $T = 400°\text{K}$, a través de un imán Stern-Gerlach de longitud $X = 1m$. Los átomos experimentan un campo magnético con un gradiente de 10 Tesla/m. Calcular la deflexión transversal de un átomo típico en cada componente del haz, debida a la fuerza ejercida sobre su momento magnético dipolar de spin, en el punto en el que el haz abandona el imán.

Para esta temperatura los átomos están en su estado base y no tienen impulso angular orbital o momento magnético dipolar orbital. Su energía cinética típica es $(3/2)kT$ donde k es la constante de Boltzman. La fuerza transversal que experimentan es, según (8-15) y (8-20)

$$F_z = -\frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_b g_s m_s$$

y puesto que $g_s m_s = \pm 1$, esto es

$$F_z = \pm \frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_b$$

La velocidad longitudinal típica v_x, de un átomo de masa M que viaja por el imán se puede evaluar mediante

$$\frac{1}{2} M v_x^2 = \frac{3}{2} kT$$

Así

$$v_x = \sqrt{\frac{3kT}{M}}$$

Entonces el tiempo t durante el cual el átomo experimenta la fuerza transversal cuando viaja a través de un imán de longitud X es

$$t = \frac{X}{v_x} = \frac{X}{\sqrt{\frac{3kT}{M}}} = X\sqrt{\frac{M}{3kT}}$$

Debido a la fuerza,existe una aceleración transversal $a_z = F_z/M$ y consecuentemente una deflexión transversal

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{2} a_z t^2 = \frac{1}{2} \frac{F_z}{M} \frac{X^2 M}{3kT} \\ &= \pm \frac{\frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_b X^2}{6kT} \\ &= \pm \frac{10 \text{ tesla/m} \times 0.927 \times 10^{-23} \text{ A-m}^2 \times 1 \text{ m}^2}{6 \times 1.38 \times 10^{-23} \text{ joule/°K} \times 400 \text{°K}} \\ &= \pm 2.8 \times 10^{-3} \text{ m} \end{aligned}$$

La separación entre las dos componentes es mas de medio centímetro lo cual es muy fácil de observar. ◀

La idea del spin del electrón fue introducida un poco antes del trabajo de Phipps y Taylor. En la frase final de un trabajo de investigación sobre la dispersión de rayos X por átomos, publicado en 1921, Compton escribió: "Entonces, puedo concluír que el electrón mismo gira como un pequeño giróscopo, y es probablemente la partícula magnética más pequeña". Esta fué en realidad una especulación más que una conclusión y aparentemente Compton nunca siguió adelante.

Por lo general, se les concede el crédito de la introducción del spin del electrón a Goudsmit y Uhlenbeck. Siendo estudiantes graduados en 1925 trataban de entender por qué ciertas líneas del espectro óptico del hidrógeno y de los átomos alcalinos están compuestas de parejas de líneas sumamente próximas. Esta es la *estructura fina* que había sido tratada por Sommerfeld en términos del modelo de Bohr como debido a un desdoblamiento de los niveles de energía atómicos proveniente de una contribución pequeña (alrededor de una parte en 10^4) a la energía total resultante de la variación relativista de la masa del electrón (ver sección 4-10). Los resultados de Sommerfeld estaban en concordancia numérica con la estructura fina observada para el hidrógeno, pero la situación no fue igualmente satisfactoria para los alcalinos. En estos átomos,se debería esperar que el electrón causante del espectro óptico se moviera en una órbita del tipo de Bohr con un radio grande a velocidad baja de modo que se esperaría que la variación relativista de la masa fuera pequeña. Sin embargo, se observó el desdoblamiento de estructura fina mucho más grande que para el hidrógeno y, en consecuencia, surgieron dudas acerca de la validez de la explicación que diera Sommerfeld sobre el origen de la estructura fina. Considerando otras posibilidades Goudsmit y Uhlenbeck proponen que un electrón tiene un impulso angular intrínseco y un momento magnético dipolar, cuyas componentes z están especificadas por un cuarto número cuántico m_s,el cual puede tomar cualesquiera de los dos valores $-1/2$ y $+1/2$. Entonces, el desdoblamiento de los niveles de energía atómicos se pueden entender como debidos a una energía potencial de orientación del momento magnético dipolar del electrón en el campo magnético que está presente en el átomo, proveniente de las partículas cargadas en movimiento. La energía de orientación podrá ser positiva o negativa dependiendo del signo de m_s,es decir, dependiendo de si el spin es "hacia arriba" o "hacia abajo" en relación a la dirección del campo magnético *interno* del átomo. (Esto no deberá confundirse con el efecto Zeeman mencionado antes, el cual implica el desdoblamiento de los niveles de energía de un

átomo debido a la energía potencial de orientación de su momento dipolar magnético respecto a un campo magnético *externo* aplicado al átomo). Uhlenbeck ha descrito las circunstancias como sigue:

"Goudsmit y yo llegamos a esta idea mientras estudiábamos un artículo de Pauli en el cual estaba formulado el famoso principio de exclusión (que será tratado en el capítulo 9) y en el cual, por primera vez, se asignaban *cuatro* números cuánticos al electrón. Esto se había hecho de manera formal y sin un esquema concreto asociado. Para nosotros esto fue un misterio. Discutíamos sobre la proposición de que a cada número cuántico le corresponde un grado de libertad (una coordenada independiente) y por otra parte sobre la idea de un electrón puntual el cual obviamente sólo tiene tres grados de libertad y no podíamos colocar el cuarto número cuántico. Solamente lo entenderíamos si se suponía al electrón como una pequeña esfera que pudiera girar.....

Un poco después encontramos en un artículo de Abraham, sobre el cual Ehrenfest llamó nuestra atención, que clásicamente se podía entender el factor dos necesario en el momento magnético ($g_s = 2$). Esto nos animó mucho pero nuestro entusiasmo se redujo considerablemente cuando vimos que la velocidad de rotación en la superficie del electrón tenía que ser ¡muchas veces más grande que la velocidad de la luz!. Recuerdo que la mayoría de estas ideas nos vinieron una tarde de fines de septiembre de 1925. Estábamos excitados pero no teníamos la menor intención de publicar algo. Parecía temerario que algo pudiera estar mal en esto, especialmente cuando Bohr, Heinsenberg y Pauli, nuestras grandes autoridades no habían propuesto nada al respecto. Por supuesto que se lo comentamos a Ehrenfest quien de inmediato se impresionó, según creo, por el caracter intuitivo de nuestra hipótesis, lo cual coincidía mucho con su línea. El llamó nuestra atención sobre varios puntos, tales como el hecho de que en 1921 A.H. Compton había sugerido la idea de un electrón en rotación como una explicación posible de la naturaleza unitaria del magnetismo y finalmente dijo que o era muy importante o no tenía sentido y que deberíamos escribir una nota corta para *Naturwissenschaften* (una revista de investigación) y dársela. Terminó con las palabras 'y entonces le preguntaremos a Lorentz'. Asi se hizo. Lorentz nos recibió con su reconocida amabilidad y se mostró muy interesado aunque, según creo, algo escéptico. Prometió pensarlo y en efecto, a la semana siguiente teníamos un manuscrito con su preciosa letra y que contenía cálculos largos sobre las propiedades electromagnéticas de los electrones en rotación. No lo entendimos bien a bien pero era claro que si se tomaba en serio la descripción del electrón giratorio se tendrían serias dificultades. Por un lado, la energía magnética debería ser tan grande que, por la equivalencia de masa y energía, el electrón debería tener una masa mayor que la del protón o si uno se aferra a la masa conocida, el electrón debería ser mas grande que ¡el átomo completo!. En cualquier caso, parecía no tener sentido. Tanto Goudsmit como yo sentimos que lo mejor sería no publicar por el momento, pero cuando se lo dijimos a Ehrenfest, nos respondió: 'Hace ya tiempo que yo mandé su carta; ambos son lo suficientemente jóvenes como para permitirse algunas tonterías' ". (Tomado del libro "*The Conceptual Development of Quantum Mechanics* by Max Jammer, McGraw-Hill, 1966).

Las evidencias experimentales más recientes indican que el electrón es una partícula puntual y ciertamente "no mayor que el átomo completo". Hay series de experimentos en los que se estudia la dispersión de electrones por electrones con energías cinéticas muy altas; si estos objetos tuvieran una extensión apreciable en el espacio, en las colisiones en las que se encuentran sumamente próximos al grado de traslaparse, se debería modificar la fuerza que actúa entre ellos —de la misma manera como ocurre en una colisión de una partícula α y un núcleo. Se ha encontrado que aun en las colisiones con mayor proximidad que se han investigado, los electrones siempre actúan como dos objetos puntuales con carga $-e$ y momento magnético dipolar μ_s. Por lo tanto, los electrones deben tener una extensión menor que esta distancia de colisión la cual es de aproximadamente 10^{-16} m. En comparación con las dimensiones de un átomo (10^{-10} m), o aún con las de un núcleo (10^{-14} m), los electrones tienen dimensiones insignificantes.

No obstante que el electrón parece ser una partícula puntual, se necesitan cuatro números cuánticos para especificar sus estados cuánticos. Los tres primeros aparecen debido a que se necesitan tres coordenadas independientes para describir su localización en un espacio tridimensional. El cuarto aparece porque también es necesario para describir la orientación de su spin en el espacio, la cual puede ser "hacia arriba" o "hacia abajo" en relación a algún eje z.

Para una partícula puntual clásica solamente hay lugar para los tres primeros números cuánticos, pero el electrón no es una partícula clásica.

La mecánica cuántica de Schrödinger es completamente compatible con la existencia del spin del electrón pero no lo predice, de manera que el spin se tiene que introducir como un postulado separado. La razón para ello es que la teoría es una aproximación que ignora los efectos relativistas. Debe recordarse que la teoría está basada en la ecuación de energía no relativista $E = p^2/2m + V$. También debe recordarse que en el capítulo 5 se hizo una mención breve del hecho de que en 1929 Dirac desarrolló una teoría relativista de la mecánica cuántica. Haciendo uso de los mismos postulados de la teoría de Schrödinger pero substituyendo la ecuación de energía por su forma relativista $E = (c^2p^2 + m_0^2c^4)^{1/2} + V$. Dirac demostró que un electrón debe tener un momento angular intrínseco $s = 1/2$, un momento magnético dipolar intrínseco con un factor g de 2 y todas las otras propiedades que se han mencionado. Este fue un gran triunfo de la teoría de la relatividad ya que puso el *spin* del electrón sobre fundamentos teóricos muy firmes y *demostró que éste está íntimamente relacionado con la relatividad.* Desgraciadamente un tratamiento cuantitativo de la teoría de Dirac escapa al nivel de este libro pero de vez en vez se describirán sus resultados cualitativos.

Otro aspecto del carácter noclásico del spin se puede ver observando que el número cuántico s, que especifica la magnitud del impulso angular de spin S, tiene el valor fijo 1/2. Por lo tanto, no es posible tomar S al límite clásico haciendo $s \to \infty$, como se hizo en la sección 7-8 para la magnitud del impulso angular orbital L haciendo que su número cuántico $l \to \infty$. Una proposición equivalente es que en el caso límite, la magnitud de S es totalmente insignificante debido a que $\hbar$ es muy pequeña, de modo que básicamente el spin no es clásico. En algunas ocasiones resulta mas dañino que de ayuda el pensar en el spin en términos de un modelo clásico como el de una esferita giratoria; pero se debe admitir que es difícil evitar el pensar en tales términos.

8.4 Interacción spin-órbita

No obstante que el spin mismo es sutil, no hay nada sutil acerca de los muchos efectos que él produce. Tal vez lo más importante es que duplica el número de electrones que el "principio de exclusión" permite para poblar los estados cuánticos de los átomos multielectrónicos. Cuando se estudie este efecto en el Capítulo 10, se verá que el estado base de los átomos se vería muy afectado si los electrones no tuvieran spin. Esto tendría profundas consecuencias sobre las propiedades periódicas de los átomos y por lo tanto sobre la química y la física del estado sólido.

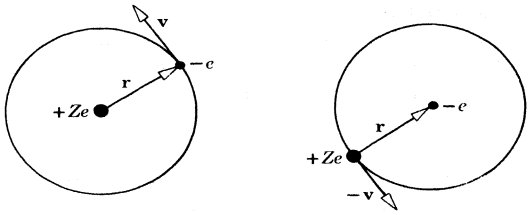
En esta sección se estudiará la interacción entre un momento magnético dipolar de spin y el campo magnético interno de un átomo monoelectrónico. Ya que el campo magnético *interno* está relacionado con el impulso angular orbital del electrón, a esta interacción se le llama *interacción spin-órbita.* Esta es una interacción relativamente débil y en parte es responsable de la *estructura fina* de los estados excitados de los átomos monoelectrónicos.

En los átomos multielectrónicos también ocurre la interacción spin-órbita, pero en ellos es razonablemente fuerte debido a que los campos magnéticos internos son muy intensos. Además, en los núcleos ocurre un efecto completamente análogo a la interacción spin-órbita y es tan intensa que gobierna las propiedades periódicas de los núcleos.

Es fácil de entender el origen del campo magnético interno que experimenta el electrón en un átomo monoelectrónico si se considera el movimiento del núcleo desde el punto de vista del electrón. En un sistema de referencia fijo en el electrón, el núcleo cargado se mueve alrededor del electrón y éste, de hecho, se encuentra localizado en el interior de una espira de corriente la cual produce el campo magnético. En la figura 8-7 se ilustra cualitativamente el argumento. Para hacer el argumento cuantitativo, obsérvese que el núcleo cargado que se mueve con velocidad $-\mathbf{v}$ constituye un elemento de corriente $\mathbf{j}$ donde

$$\mathbf{j} = -Ze\mathbf{v}$$

FIGURA 8-7
Izquierda: Vista desde el núcleo del movimiento de un electrón que se encuentra en una órbita circular de Bohr. *Derecha*: El mismo movimiento pero visto por el electrón. Desde el punto de vista del electrón, el núcleo se mueve alrededor de él. El campo magnético **B** que experimenta el electrón apunta hacia afuera de la página y se localiza en el electrón.



De acuerdo con la ley de Ampere, éste produce un campo magnético **B** que en la posición del electrón es

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\mathbf{j} \times \mathbf{r}}{r^3} = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi}\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}$$

Que resulta conveniente expresarla en términos del campo eléctrico **E** que actúa sobre el electrón. Según la ley de Coulomb

$$\mathbf{E} = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0}\frac{\mathbf{r}}{r^3}$$

Y de ambas ecuaciones

$$\mathbf{B} = -\epsilon_0\mu_0\mathbf{v} \times \mathbf{E}$$

o

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{8-24}$$

ya que $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$. La cantidad **B** es la intensidad del campo magnético experimentado por el electrón cuando éste se mueve con velocidad **v** relativa al núcleo en un campo eléctrico de intensidad **E** producido por el propio núcleo. La ecuación (8-24) es de validez general y se puede derivar de condiciones relativistas.

El electrón y su momento magnético dipolar de spin pueden tener diferentes orientaciones en el campo magnético interno del átomo y su energía potencial es diferente para cada una de estas orientaciones. Si se evalúa la energía potencial de orientación del momento magnético dipolar en este campo magnético mediante una ecuación análoga a (8-13) se tiene

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$$

Que se puede escribir en términos del impulso angular de spin del electrón (**S**) utilizando la ecuación (8-19)

$$\Delta E = \frac{g_s\mu_b}{\hbar}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

Pero esta energía se ha evaluado en un sistema de referencia en la cual el electrón está en reposo, mientras que lo interesante sería medir la energía en el sistema de referencia normal en el cual el núcleo está en reposo. Debido a un efecto, llamado *precesión de Thomas*, en la transformación de velocidades relativistas al regresar al sistema de referencia del núcleo resulta una reducción de la energía potencial de orientación por un factor 2, Por lo tanto, la energía de interacción spin-órbita es

$$\Delta E = \frac{1}{2}\frac{g_s\mu_b}{\hbar}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \tag{8-25}$$

La transformación que conduce al factor 2 es muy interesante aunque complicada de modo que no se muestra aquí sino en el apéndice **J**.

Se encontrará conveniente expresar (8-25) en términos de **S.L**., el producto punto o escalar de los vectores de spin y de impulso angular orbital; con este fin se utiliza en la ecuación 8-24 la relación

$$-e\mathbf{E} = \mathbf{F}$$

entre el campo eléctrico **E** y la fuerza **F** que actúa sobre la carga del electrón —e. También se usa la relación

$$\mathbf{F} = -\frac{dV(r)}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

entre la fuerza y el potencial. (El término $\mathbf{r}/r$ es un vector unitario en la dirección radial y que dá a **F** la dirección apropiada).Con estas relaciones (8-24) queda

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{ec^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{v}\times\mathbf{r}$$

Multiplicando y dividiendo por y entre la masa del electrón es posible escribir esta ecuación en términos del impulso angular orbital $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times m\mathbf{v} = -m\mathbf{v}\times\mathbf{r}$, como

$$\mathbf{B} = \frac{1}{emc^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{L} \tag{8-26}$$

Obsérvese que la intensidad del campo magnético **B** que experimenta el electrón por el hecho de moverse alrededor del núcleo con impulso angular orbital **L**, es proporcional a la magnitud de **L** y paralelo a él. Con este resultado, se puede expresar la energía de interacción spin-órbita (8-25) como

$$\Delta E = \frac{g_s\mu_b}{2emc^2\hbar}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

Evaluando g_s y μ_b, se obtiene

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{I} \tag{8-27}$$

Esta ecuación fue derivada por primera vez por Thomas en 1926 y es, como se ha visto, una combinación del modelo de Bohr, mecánica cuántica de Schrödinger y cinemática relativista. Sin embargo, concuerda totalmente con los resultados de la mecánica cuántica relativista de Dirac. Es importante en la teoría de átomos multielectrónicos asi como en la de átomos con un solo electrón. Además, como se verá con posterioridad, existe una ecuación similar que es de importancia fundamental para entender la teoría de la estructura de los núcleos.

Ejemplo 8-3. Estimar la magnitud de la energía potencial de orientación ΔE para el estado $n = 2$; $l = 1$ del átomo de hidrógeno con objeto de comprobar si es del mismo orden de magnitud que el desdoblamiento de estructura fina observado del nivel de energía correspondiente. (No existe energía spin-órbita en el estado $n = 1$, ya que para $n = 1$ el único valor posible de l es $l = 0$ que significa $L = 0$).

El potencial es

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}r^{-1}$$

Así que

$$\frac{dV(r)}{dr} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} r^{-2}$$

y

$$\Delta E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

La magnitud de **S.L.** es aproximadamente $\hbar^2$ ya que cada uno de estos vectores de impulso angular tiene una magnitud de aproximadamente $\hbar$. El valor esperado de $1/r^3$ para el estado $n = 2$ es aproximadamente $1/(3a_0)^3$. Entonces

$$\begin{aligned} |\Delta E| &\sim \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2m^2c^2} \frac{1}{3^3} \frac{m^3e^6}{(4\pi\epsilon_0)^3\hbar^6} \hbar^2 = \frac{me^8}{54 \times (4\pi\epsilon_0)^4 c^2 \hbar^4} \\ &= \frac{(9 \times 10^9 \text{nt-m}^2/\text{coul}^2)^4 \times 9 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1.6 \times 10^{-19} \text{ coul})^8}{54 \times (3 \times 10^8 \text{ m/seg})^2 \times (1.1 \times 10^{-34} \text{ joule-seg})^4} \\ &\sim 10^{-23} \text{ joule} \sim 10^{-4} \text{ eV} \end{aligned}$$

Puesto que **S.L.** puede ser tanto positivo como negativo, dependiendo de la orientación relativa de los dos vectores, el nivel de energía se desdobla aproximadamente 2×10^{-4} eV.

Comparando esto con la energía para el nivel $n = 2$, $l = 1$ del hidrógeno, $E_2 = -3.4$ eV, se ve que la relación del desdoblamiento de la energía predicho a la energía misma $|\Delta E/E|$, es alrededor de una parte en 10^4. Esta es una concordancia razonable con el desdoblamiento necesario para explicar la estructura fina de las líneas del espectro del hidrógeno asociadas con este nivel, tal y como se discutió en la sección 4-10 y, por lo tanto, proporciona una confirmación de la teoría que se ha desarrollado. En breve se hará una comprobación mas detallada entre la teoría y la experimentación. ◀

Ejemplo 8-4. Estimar la magnitud del campo magnético **B** que actúa sobre el momento magnético dipolar de spin del electrón del ejemplo 8-3.

De una ecuación análoga a (8-13), se tiene $\Delta E = -\mu_s \cdot \mathbf{B}$. De modo que

$$|\Delta E| \sim \mu_s B$$

donde

$$\mu_s \sim \mu_b \sim 10^{-23} \text{ A-m}^2$$

por lo tanto

$$B \sim \frac{10^{-23} \text{ joule}}{10^{-23} \text{ A-m}^2} \sim 1 \text{ tesla}$$

Este es aproximadamente igual al campo producido por un electroimán que opera en el límite en el cual se satura su núcleo de fierro. Se ve que el momento magnético dipolar de spin del electrón es afectado un campo magnético intenso debido a que se mueve a una gran velocidad a través del campo eléctrico intenso que rodea al núcleo. ◀

8.5 Impulso angular total

Si no existiera interacción spin-órbita, los impulsos angulares orbital y de spin **L** y **S** de un electrón en un átomo serían independientes entre sí, de modo que independientemente se sujetarían a la ley de conservación del impulso angular que predice la mecánica cuántica y que se estudió en la sección 7-8. Esto es, cuando un átomo sin interacción spin-órbita se encuentra en el espacio libre no existen impulsos rotativos sobre **L** o **S**, de modo que ambos vectores

deberían precederse aleatoriamente alrededor del eje z de tal modo que sus magnitudes y sus componentes L, L_z, S, S_z, deberían tener valores fijos. Estos valores fijos son los especificados por los números cuánticos l, m_l, s, m_s.

Sin embargo, *existe* una interacción spin-órbita. Esto es, sobre el electrón en el átomo actúa un campo magnético interno intenso, la orientación del electrón está determinada por **L** y el campo produce un impulso rotativo sobre su momento magnético dipolar de spin cuya orientación está determinada por **S**. Como en el caso de la precesión de Larmor de la sección 8-2 el impulso rotativo no cambia la magnitud de **S** y tampoco el impulso rotativo de reacción que actúa sobre **L** cambia su magnitud. Pero el impulso rotativo provoca un acoplamiento entre **L** y **S** que hace que la orientación de cada uno dependa de la orientación del otro. Como resultado existirán vectores de impulso angular que siguen movimientos distintos de los que seguirían si no existiera interacción spin-órbita, y se preceden alrededor de su suma en vez de hacerlo alrededor del eje z. Puesto que estos vectores no se preceden alrededor del eje z sus componentes z, L_z y S_z, no tienen valores fijos cuando existe interacción spin-órbita.

La situación se muestra en la figura 8-8 que muestra a **L** y a **S** precediéndose a causa del acoplamiento de interacción spin-órbita. El movimiento es complicado, pero no tan complicado como debería ya que deben moverse en tal forma que su suma, el *impulso angular total* **J**, satisfaga la ley de conservación del impulso angular que predice la mecánica cuántica. Esto es, si el átomo está en el espacio libre de modo que no hay torcas externas actuando sobre él, su impulso angular total

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{8-28}$$

mantiene fija su magnitud J y su componente z (J_z), mientras que sus componentes x (J_x) e y (J_y) fluctúan alrededor de cero. Los vectores **L** y **S** se preceden alrededor de su suma **J** y sus componentes en la dirección de **J** permanecen fijas de modo que su magnitud J es fija. Simultáneamente **J** precede alrededor del eje z manteniendo una componente fija J_z. Conforme se continúe con el estudio de los átomos se encontrará que el impulso angular total resulta muy útil debido al comportamiento simple de su magnitud y componente z. Esto es particularmente cierto en el caso de átomos multielectrónicos donde muchos impulsos angulares orbital y de spin, que componen el impulso angular total, tienen comportamientos muy complicados.

Mediante técnicas similares a las usadas en la sección 7-8 para estudiar las propiedades del impulso angular orbital, se puede demostrar que la magnitud y la componente z del impulso

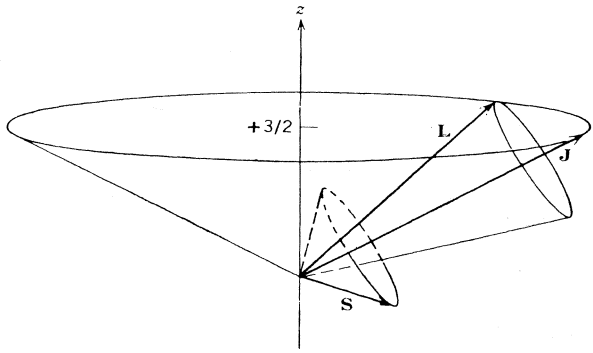


FIGURA 8-8
Los vectores de impulso angular **L**, **S** y **J** para un caso típico de un estado con $l = 2, j = 5/2$, $m_j = 3/2$. Los vectores **L** y **S** se preceden uniformemente alrededor de su suma **J**, al tiempo que **J** precede caóticamente alrededor del eje z.

angular total **J** están especificadas por dos números cuánticos j y m_j, de acuerdo con las condiciones usuales de cuantización

$$J = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar \tag{8-29}$$

y

$$J_z = m_j\hbar \tag{8-30}$$

Los valores posibles del número cuántico m_j son, como era de esperarse

$$m_j = -j, -j+1, \ldots, +j-1, +j \tag{8-31}$$

Se pueden determinar los valores posibles del número cuántico j tomando la componente z de (8-28) que define a **J**. Esto es

$$J_z = L_z + S_z$$

lo cual es

$$m_j\hbar = m_l\hbar + m_s h$$

o

$$m_j = m_l + m_s \tag{8-32}$$

Puesto que el máximo valor posible de m_l es l y el máximo valor posible de m_s es $s = 1/2$, el máximo valor posible de m_j es

$$(m_j)_{\max} = l + 1/2$$

Según (8-31) éste es también el máximo valor posible de j. Al igual que los otros números cuánticos de impulso angular, los valores posibles de j difieren por enteros. Por lo tanto, estos valores deberán ser miembros de la serie decreciente

$$j = l + 1/2, l - 1/2, l - 3/2, l - 5/2, \ldots$$

Para determinar dónde termina la serie, deberá usarse la desigualdad vectorial

$$|\mathbf{L} + \mathbf{S}| \geq ||\mathbf{L}| - |\mathbf{S}||$$

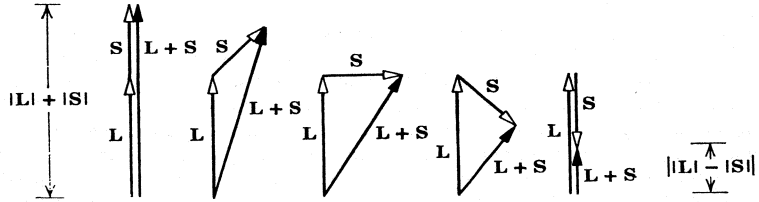


FIGURA 8-9
Diagramas de vectores que muestran que para cualesquiera dos vectores **L** y **S** la magnitud de su suma $|\mathbf{L} + \mathbf{S}|$ siempre es por lo menos tan grande como la magnitud de la diferencia de sus magnitudes, $||\mathbf{L}| - |\mathbf{S}||$. Se muestra el caso para el cual $|\mathbf{L}| > |\mathbf{S}|$ y el estudiante puede demostrar en su propio diagrama que la conclusión es la misma si $|\mathbf{L}| < |\mathbf{S}|$.

cuya validez se puede demostrar mediante un examen de la figura 8-9. Escribiendo $\mathbf{L}+\mathbf{S}$ como $\mathbf{J}$, de la desigualdad se tiene

$$|\mathbf{J}| \geq |\,|\mathbf{L}| - |\mathbf{S}|\,|$$

o

$$\sqrt{j(j+1)}\,\hbar \geq |\sqrt{l(l+1)}\,\hbar - \sqrt{s(s+1)}\,\hbar|$$

De donde se puede demostrar sin dificultad que ya que $s = 1/2$, existen por lo general dos miembros de la serie que satisfacen la desigualdad, estos son

$$j = l + 1/2,\ l - 1/2 \qquad \text{(8-33a)}$$

Es aun más evidente que si $l = 0$ sólo existe un valor posible de j, digamos

$$j = 1/2 \qquad \text{si } l = 0 \qquad \text{(8-33b)}$$

El contenido de las ecuaciones establece que los valores posibles de los números cuánticos m_j y j se pueden representar en términos de las reglas de adición vectorial mediante la

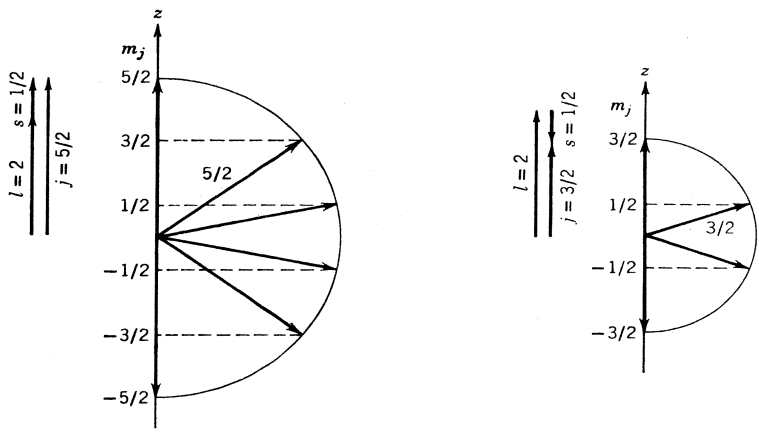


FIGURA 8-10

Diagrama de vectores que representa las reglas para sumar los números cuánticos $l = 2$ y $s = 1/2$ a fin de obtener los valores posibles para los números cuánticos j y m_j. *Izquierda*: El máximo valor posible de j se obtiene cuando un vector de magnitud l se suma con un vector paralelo de magnitud s, resultando $j = l + s = 2 + 1/2 = 5/2$. La máxima componente z posible de este vector da el valor máximo posible del número cuántico m_j, y la componente z mínima posible da el valor mínimo posible de m_j. Los valores intermedios de m_j difieren por enteros. Por lo tanto, los valores posibles son m_j = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2. *Derecha*: Un vector de magnitud $l = 2$ se suma a un vector antiparalelo de magnitud $s = 1/2$ para dar un vector de magnitud $j = l - s = 2 - 1/2 = 3/2$, que representa el valor mínimo posible del número cuántico j. Las posibles componentes z del vector de magnitud $j = 3/2$ y que difieren en valor por enteros, corresponden a los valores posibles m_j = -3/2, - 1/2, 1/2 3/2. No existen valores de j intermedios entre 5/2 y 3/2 ya que sus valores posibles también difieren por enteros. Obsérvese que estos diagramas *no* representan con precisión la suma de los impulsos angulares asociados con los números cuánticos.

construcción de un conjunto de vectores de longitudes proporcionales a los valores de los números cuánticos l, s, y j. Esto se muestra en el ejemplo siguiente.

Ejemplo 8-5. Enumerar los valores posibles de los números cuánticos j y m_j, para estados en los cuales $l = 2$ y, por supuesto $s = 1/2$.

Según (8-33a) los dos valores posibles de j son 5/2 y 3/2. De acuerdo con (8-31) para $j = 5/2$ los valores posibles de m_j son —5/2, —3/2, —1/2, 1/2, 3/2, 5/2. La misma ecuación establece que para j = 3/2 los valores posibles de m_j son —3/2, —1/2, 1/2, 3/2. Los diagramas vectoriales para este caso se muestran en la figura 8-10. Su interpretación resulta obvia de la simple inspección. ◀

Los diagramas del tipo de los mostrados en la figura 8-10 representan solamente las reglas para sumar *números cuánticos l* y *s* para obtener los valores posibles de los números cuánticos j y m_j. Si la relación entre la magnitud de un vector de impulso angular, tal como L, y su número cuántico asociado fuera $L = l\hbar$, en vez de $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$, estos diagramas también representarían la suma de los *impulsos angulares* **L** y **S** para obtener el impulso angular **J** y su componente z, J_z. Ya que esta relación es aproximadamente válida, tales diagramas se usan algunas veces en análisis sobre estructura atómica como una descripción simplificada de la suma de los mismos vectores de impulso angular. Esta descripción es otra forma del *modelo vectorial* del átomo. La descripción es útil pero deberá recordarse que sólo es una aproximación. **Una descripción cuidadosa del comportamiento del impulso angular debería tener una apariencia similar a la que se mostró previamente en la figura 8-8, la cual muestra los vectores de impulso angular para el caso $l = 2, j = 5/2, m_j = 3/2$.**

8.6 Energía de interacción spin-órbita y niveles de energía del hidrógeno

En la primera parte de esta sección se obtendrá una expresión para la energía de interacción spin-órbita en términos de la función potencial $V(r)$ y de los números cuánticos l, s y j. En la segunda parte se explicará el modo de usar la expresión para predecir en detalle la estructura de los niveles de energía del átomo de hidrógeno. La expresión para la energía de interacción spin-órbita también entrará, en varias ocasiones, en los análisis posteriores sobre átomos multielectrónicos y núcleos ya que en éstos la interacción spin-órbita es muy fuerte.

De acuerdo con (8-27) la energía de interacción spin-órbita es

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

Para expresar esto en términos de l, s y j, se puede empezar por escribir

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Tomar el producto punto de esta igualdad consigo misma y utilizar el hecho de que $\mathbf{L}.\mathbf{S} = \mathbf{S}.\mathbf{L}$, entonces se tiene

$$\mathbf{J}\cdot\mathbf{J} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{L} + \mathbf{S}\cdot\mathbf{S} + 2\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

Así que

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} = (\mathbf{J}\cdot\mathbf{J} - \mathbf{L}\cdot\mathbf{L} - \mathbf{S}\cdot\mathbf{S})/2$$

o

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} = (J^2 - L^2 - S^2)/2 \qquad (8\text{-}34)$$

En un estado cuántico asociado con los números cuánticos l, s, y j cada uno de los términos del segundo miembro tiene un valor fijo y $\mathbf{S}.\mathbf{L}$ tiene el valor fijo

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Entonces

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}$$

La energía spin-órbita para el estado es justo el valor de expectación de esta cantidad. Esto es, la energía que proviene de la interacción spin-órbita es

$$\overline{\Delta E} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\overline{\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}} \tag{8-35}$$

donde el valor de expectación $\overline{(1/r)dV(r)/dr}$ se calcula usando la función potencial $V(r)$ para el sistema y la densidad de probabilidad (de hecho la densidad de probabilidad radial $r^2R_{nl}^*R_{nl}$) para el estado de interés. Como se indicó con anterioridad, (8-35) es una expresión conveniente de un resultado importante.

Ahora se considerarán los niveles de energía del átomo de hidrógeno. En la sección 7-5 se obtuvieron las predicciones de la mecánica cuántica para los niveles de energía de un átomo de hidrógeno en el cual no se consideró la interacción spin-órbita y se encontró que éstas son simplemente las predicciones del modelo de Bohr. En el ejemplo 8-3 se estimó el cambio en la energía de uno de estos niveles debido a la presencia de la interacción spin-órbita. Se encontró que la energía se corre hacia arriba alrededor de una parte en 10^4 si $\mathbf{L}$ es aproximadamente antiparalelo a $\mathbf{S}$ (si $j = l + 1/2$) y hacia abajo, por la misma cantidad, si $\mathbf{L}$ es aproximadamente antiparalelo a $\mathbf{S}$ (si $j = l - 1/2$). También se vio que obviamente no existe corrimiento por spin-órbita si $\mathbf{L} = 0$ (si $j = 1/2$).

Con objeto de obtener predicciones cuantitativas de los corrimientos de los niveles de energía por interacción spin-órbita en el átomo de hidrógeno a partir de la expresión general de 8-35, se toma la función potencial igual al potencial de Coulomb $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$, y entonces se calcula el valor de expectación $\overline{(1/r)\,dV\,(r)/dr}$ usando las eigenfunciones del átomo de hidrógeno. Sin embargo, antes de que estas predicciones se puedan comparar con los experimentos se deberán tomar en cuenta otros efectos de importancia comparables con éste. Cuando se analizó en la sección 4-10 la modificación relativista de Sommerfeld para el modelo de Bohr, se estimó que el corrimiento debido a la dependencia relativista de la masa con la velocidad en un nivel de energía típico de un átomo de hidrógeno es alrededor de una parte en 10^4. De modo que este efecto relativista produce corrimientos en la energía del átomo de hidrógeno comparables con los producidos por la interacción spin-órbita el cual, de hecho, también es un efecto relativista pero distinto. Un tratamiento completo de todos los efectos relativistas sobre los niveles de energía del átomo de hidrógeno se puede dar solamente en términos de la teoría de Dirac. Pero es posible obtener resultados casi completos (excepto para los estados con $l = 0$) a partir de la teoría de Schrödinger añadiendo a la fórmula para los niveles de energía del hidrógeno tanto el valor de expectación de la corrección a la energía debido a la interacción spin-órbita como el valor de expectación de la corrección a la energía debido a la dependencia de la masa con la velocidad. En este libro no se hará por dos razones: (1) involucra cálculos muy largos y (2) los efectos relativistas, distintos de la interacción spin-órbita, solamente son importantes para el hidrógeno y unos cuantos átomos con número atómico Z pequeño. Para átomos típicos con valores de Z medianos y grandes y para los niveles que se encuentran en sus espectros ópticos, la energía asociada con estos efectos relativistas per-

manece en el orden de 10^{-4} veces la energía del nivel; pero como se verá posteriormente la energía de interacción spin-órbita aumenta muy rápidamente con el incremento en Z. La interacción spin-órbita es el único efecto de los considerados aquí que es de importancia general en un átomo típico y del cual ya se ha dicho suficiente. Por lo tanto simplemente se presentarán los resultados del tratamiento **relativista de Dirac**, para los niveles de energía del átomo de hidrógeno que predice que las energías son:

$$E = -\frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right)\right] \tag{8-36}$$

En esta ecuación μ se refiere a la masa reducida del electrón $\mu = mM/(m+M)$, y α es la *constante de estructura fina*. $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c \simeq 1/137$.

Si el lector compara estos resultados de la teoría de Dirac con los resultados del modelo de Sommerfeld expresados en (4-27a) y (4-27b) podrá observar que básicamente son los mismos. (Tanto $j + 1/2$ como n_θ son enteros que corren de 1 a n). Puesto que el modelo de Sommerfeld está basado en el modelo de Bohr simplemente es una burda aproximación de la realidad física. Por el contrario, la teoría de Dirac representa una expresión extremadamente refinada de la compren-

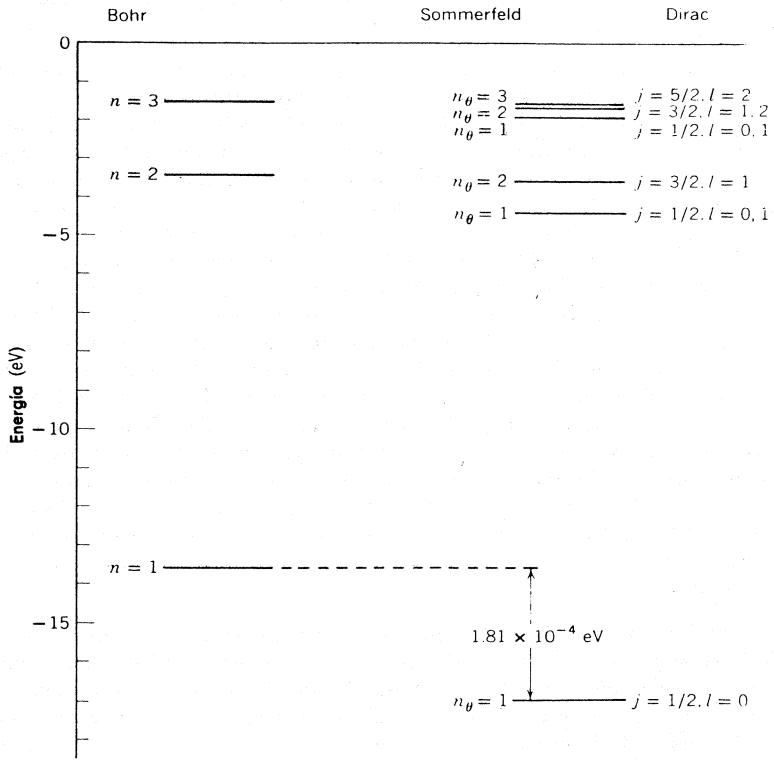


FIGURA 8-11
Los niveles de energía del átomo de hidrógeno para $n = 1, 2, 3$ de acuerdo con Bohr, Sommerfeld y Dirac. Los desplazamientos de los niveles de Sommerfeld y Dirac respecto a los de Bohr se han exagerado por un factor $(1/\alpha)^2 \simeq (137)^2 \simeq 1.88\times10^4$.

sión de la realidad física. El que estas dos teorías condujeran esencialmente a los mismos resultados para el átomo de hidrógeno fue una coincidencia que causó mucha confusión en los años 20 cuando la teoría cuántica estaba en pleno desarrollo. La coincidencia ocurre debido a los errores que se cometen en el modelo de Sommerfeld al ignorar la interacción spin-órbita y utilizar la mecánica clásica para evaluar el corrimiento promedio de la energía, debido a la dependencia relativista de la masa con la velocidad que para el caso del átomo de hidrógeno se anulan.

En la figura 8-11 se muestran los niveles de energía del átomo de hidrógeno predichos por Bohr, Sommerfeld y Dirac. Con objeto de hacer notorios los desdoblamientos de los niveles de energía, llamados *estructura fina,* se han exagerado por un factor de $(137)^2 = 1.88 \times 10^4$, los corrimientos de los niveles de energía dados por Sommerfeld y Dirac respecto a los dados por Bohr. Por lo tanto, los diagramas estarían completamente a escala si el valor de la constante de estructura fina α fuera 1 en vez de $\simeq 1/137$. En el diagrama de niveles de energía de Dirac no se muestran los valores del número cuántico m_j, que especifica la orientación del átomo en el espacio ya que si no hay campos externos su energía es independiente de la orientación. En el modelo de Sommerfeld existe un número cuántico similar de orientación espacial cuyos valores no se muestran en los niveles de energía correspondientes, debido a que tal número no tiene importancia a menos que exista un campo externo aplicado al átomo. Tampoco se muestran los niveles de energía del hidrógeno medidos por espectroscopia óptica, los cuales observan una gran concordancia tanto con los niveles de Sommerfeld como con los de Dirac.

La única diferencia entre los resultados de estos dos tratamientos es que el de Dirac predice que para la mayoría de los niveles existe una degeneración (además de la degeneración trivial respecto a la orientación espacial que recién se mencionó) debida a que la energía depende de los números cuánticos n y j pero es independiente del número cuántico l. Puesto que por lo general para el mismo valor de j corresponden dos valores de l, la teoría de Dirac predice que, en realidad, la mayoría de los niveles serán dobles. Predicción que fue verificada experimentalmente por Lamb en 1947 cuando se demostró que para $n = 2$ y $j = 1/2$ existen dos niveles los cuales de hecho no coinciden. El nivel $l = 0$ se encuentra por encima del nivel $l = 1$ por aproximadamente un décimo de la separación entre este nivel y el nivel $n = 2, j = 3/2$ $l = 1$. Los experimentos consisten en mediciones de la frecuencia de los fotones absorbidos en las transiciones entre los niveles, utilizando el aparato que se muestra en la figura 8-12. La separación en energía entre estos niveles es tan pequeña que la frecuencia está en la región de microondas de radio y puesto que estas mediciones se pueden hacer con mucha precisión, es posible obtener la separación en energía hasta con cinco cifras significativas. Estas medidas tan precisas del llamado *corrimiento Lamb* se pueden explicar con detalle en términos de la teoría de la *electrodinámica cuántica,* la cual también explica la ligera desviación del valor 2 que se observa en el factor g del espín y que se mencionó en la sección 8-3. En este libro no es posible desarrollar esta teoría tan sofisticada pero si se estudiará en la siguiente sección en relación con la radiación por átomos excitados y en el capítulo 17 en relación con las propiedades de las partículas elementales.

A pesar de su escala tan exagerada, la figura 8-11 no puede mostrar el *desdoblamiento hiperfino* de los niveles de energía, que en el caso del hidrógeno es debido a la interacción entre el campo magnético interno producido por el movimiento del electrón y el momento magnético dipolar del *núcleo.* Como los momentos magnéticos dipolares nucleares son menores que los momentos magnéticos dipolares electrónicos por un factor $\sim 10^{-3}$, el desdoblamiento hiperfino es menor que el desdoblamiento por el mismo factor. No obstante, posteriormente se verá que este efecto se puede entender cuantitativamente en términos de la mecánica cuántica de Schrödinger y puede utilizarse para medir el spin de los núcleos y los momentos magnéticos. De hecho, cualquier aspecto del comportamiento de un átomo de hidrógeno se puede explicar en detalle la mediante las teorías de la física cuántica.

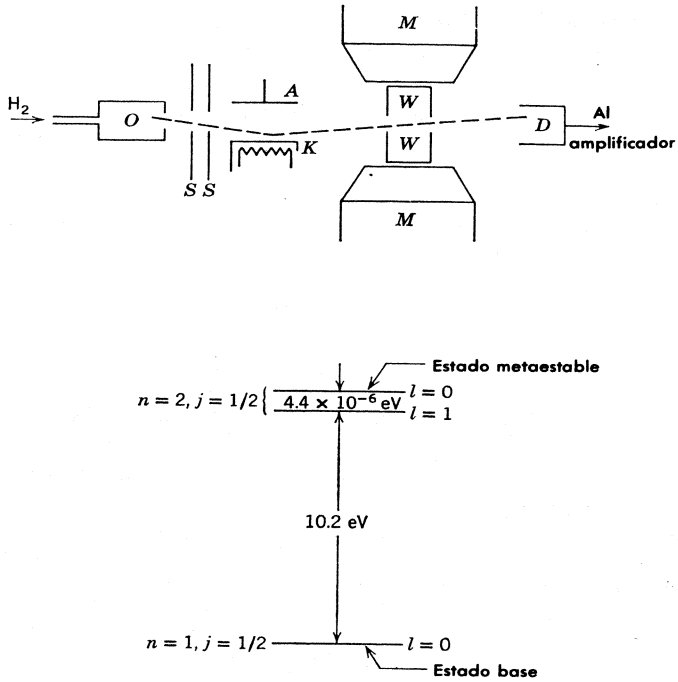


FIGURA 8-12
Aparato de Lamb y Rutherford. El hidrógeno molecular (H_2) que entra al horno O se disocia en hidrógeno atómico que sale del horno y pasa a través de las rendijas S, S. El arreglo K, A es efectivamente un diodo al vacío, los electrones son emitidos del cátodo caliente K y acelerados hacia el ánodo A. Al pasar el hidrógeno por esta región algunos de los átomos chocan con los electrones y son excitados al nivel $n = 2$, $l = 0$ descrito en el texto. A este estado se le llama estado metaestable debido a que el decaimiento de él al estado base ($n = 1$, $l = 0$) está fuertemente inhibido por la regla de selección Δl y porque todos los otros estados están por encima de él a excepción del estado $n = 2$, $l = 1, j = 1/2$, el cual según la teoría de Dirac tiene exactamente la misma energía que el estado metaestable. Sin embargo, el experimento demostró que en efecto el estado $l = 1$ estaba 4.4 μeV por debajo del estado metaestable. Estos niveles se muestran debajo del aparato.

Los átomos metaestables salen de la región de colisión K, A y son detectados por el detector D. Cualquier mecanismo que cause que estos átomos sufran una transición al estado $l = 1$ (las transiciones al estado base están prohibidas) darán como resultado un decremento en la señal de D, el cual solamente es sensible a los átomos metaestables. Esas transiciones se pueden inducir haciendo que los átomos pasen por una región en la que existe un campo eléctrico alterno cuya frecuencia ν sea tal que $h\nu \simeq 4.4$ μeV, o $\nu \simeq 1060$ MHz. Este campo alterno lo proporciona una guía de ondas WW, a través de cuyas paredes pasa el haz.

Para medir con exactitud la diferencia de energía (corrimiento Lamb) entre los estados metaestable ($l = 0$) y $l = 1$, (ambos con $n = 2, j = 1/2$), en principio se podría variar la frecuencia ν, buscar el valor que maximizara la transición del primer estado al último y asi minimizar la señal de D. En la práctica, no es fácil ajustar la frecuencia y en vez de ello se ajustan los niveles cierta cantidad mediante un imán MM, entonces este corrimiento es debido al efecto Zeeman.

8.7 Razones de transición y reglas de selección

Si los átomos de hidrógeno son excitados a sus niveles superiores, por ejemplo mediante colisiones con electrones energéticos en un tubo de descarga, realizarán transiciones a menores niveles de energía de manera espontánea. En cada transición entre un par de niveles se emite un fotón de frecuencia igual a la diferencia de sus energías dividida entre la constante de Planck. Las frecuencias discretas emitidas en todas las transiciones que ocurren constituyen las "líneas" del espectro, pero las mediciones muestran que no todas las transiciones concebibles ocurren. Sólo se observan los fotones cuyas frecuencias corresponden a transiciones entre niveles de energía cuyos números cuánticos satisfacen las *reglas de selección.*

$$\Delta l = \pm 1 \tag{8-37}$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \tag{8-38}$$

Esto es, solamente transiciones que ocurren entre niveles cuyos números cuánticos l difieren en uno y cuyos números cuánticos j difieren por cero o por uno. Las mediciones de los espectros de otros átomos con un electrón demuestran que estas reglas de selección son aplicables a las transiciones en este tipo de átomos.

Tal como se estudió en la sección 4-11, algunas de las reglas de selección podrían justificarse en la teoría cuántica antigua mediante el uso del *principio de correspondencia* para recurrir a ciertas restricciones aplicables en el límite clásico, pero las predicciones de esta técnica no fueron confiables. Además, la teoría cuántica antigua no tiene nada que decir sobre las razones de *transición atómicas.* Razón de transición es la probabilidad por segundo de que un átomo en cierto nivel de energía sufra una transición a algún otro nivel de energía. Es fácil medir un ritmo de transición midiendo la probabilidad, por segundo, de detectar un fotón de la energía correspondiente, ya que ésta es proporcional a la intensidad de la línea espectral correspondiente. De manera que en efecto sería posible calcular una razón de transición a partir de la teoría atómica. Un rasgo impresionante de la mecánica cuántica de Schrödinger es que esto se puede hacer sin dificultad utilizando las eigenfunciones atómicas. Por supuesto que todas las reglas de selección se pueden obtener de los cálculos de las razones de transición, ya que *una regla de selección justamente especifica cuales de las transiciones tienen razones tan pequeñas que normalmente no se observan.*

En el ejemplo 5-13 y en los análisis subsecuentes se ha utilizado la mecánica cuántica elemental con objeto de desarrollar la mayor parte de la descripción física que proporciona la teoría para la emisión de fotones por átomos excitados. Según este ejemplo, si la función de onda que describe un átomo es la función de onda asociada con un estado cuántico simple, entonces la función de densidad de probabilidad para el átomo será constante en el tiempo; pero si la función de onda es una mezcla de las funciones de onda asociadas con dos estados cuánticos que corresponden a dos niveles de energía E_2 y E_1, entonces la densidad de probabilidad contiene términos que oscilan en el tiempo a una frecuencia $\nu = (E_2 - E_1)/h$. Puesto que el electrón se puede localizar en cualquier sitio en el que la densidad de probabilidad tiene un valor apreciable, la carga que éste lleva no está confinada a un sitio particular. En efecto, el átomo tiene una distribución de carga que es proporcional a su densidad de probabilidad. Por lo tanto, cuando el átomo es una mezcla de dos estados cuánticos su distribución de carga oscila precisamente a la frecuencia del fotón emitido en la transición entre los estados. Esto es así ya que el fotón lleva el exceso de energía $E_2 - E_1$, de manera que tiene la frecuencia $\nu = (E_2 - E_1)/h$.

El aspecto más simple de distribución de carga del átomo susceptible de oscilar es el *momento eléctrico dipolar,* el cual es el producto de la carga del electrón por el valor de expectación de su vector de desplazamiento (tomado desde el núcleo al que se le considera esencialmente fijo). El momento eléctrico dipolar es una medida de la separación del centro de la distribución de carga

del electrón respecto al centro nuclear del átomo. Aún en la física clásica, una distribución de carga que es constante en el tiempo no emitirá radiación electromagnética mientras que una distribución de carga con un momento eléctrico dipolar oscilante emite radiación de la misma frecuencia que la frecuencia del oscilador. En efecto, un dipolo eléctrico oscilante es el radiador más eficiente.

Para obtener los factores importantes en la fórmula para las razones de transición atómicas se puede utilizar la fórmula clásica para el ritmo de emisión de energía de un dipolo eléctrico oscilante. En el apéndice B se muestra que el dipolo radía energía electromagnética con razón promedio $\bar{R}$, donde

$$\bar{R} = \frac{4\pi^3\nu^4}{3\epsilon_0 c^3} p^2 \tag{8-39}$$

con p la amplitud de su momento eléctrico dipolar oscilante y ν la frecuencia de la oscilación. Puesto que la energía es transportada por fotones cuyas energías son de magnitud $h\nu$, el ritmo de emisión de fotones, R, es

$$R = \frac{\bar{R}}{h\nu} = \frac{4\pi^3\nu^3}{3\epsilon_0 hc^3} p^2 \tag{8-40}$$

Esta probabilidad que tiene un fotón de ser emitido en el intervalo de un segundo es justamente igual a la probabilidad por segundo de que el átomo sufra la transición. Por lo tanto **R** también es la *razón de transición* atómica.

Con relación a un origen en el núcleo, considerado como fijo, el momento dipolar eléctrico **P** del átomo con un electrón, se define por

$$\mathbf{p} = -e\mathbf{r} \tag{8-41}$$

donde $-e$ es la carga del electrón y **r** es el vector de posición desde el núcleo en el origen. Para obtener una expresión para la amplitud del momento eléctrico dipolar oscilante del átomo cuando éste es una mezcla de dos estados, se calcula el valor de expectación de **P** utilizando la densidad de probabilidad de estados mezclados que se obtuvo en el ejemplo 5-13

$$\Psi^*\Psi = c_1^* c_1 \psi_1^* \psi_1 + c_2^* c_2 \psi_2^* \psi_2 + c_2^* c_1 \psi_2^* \psi_1 e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + c_1^* c_2 \psi_1^* \psi_2 e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}$$

Con estos argumentos no existe forma de determinar con precisión qué valores de las constantes ajustables c_1 y c_2 deberán usarse para especificar qué tanto de los dos estados cuánticos se mezcla. Pero como se verá en breve, los resultados son independientes de los valores y por lo tanto, por simplicidad, se tomarán igual a 1. Entonces, se tiene:

$$\Psi^*\Psi = \psi_f^* \psi_f + \psi_i^* \psi_i + \psi_i^* \psi_f e^{i(E_i-E_f)t/\hbar} + \psi_f^* \psi_i e^{-i(E_i-E_f)t/\hbar}$$

donde se han substituido los índices 2 y 1 por i y f para los estados inicial y final. Como esta densidad de probabilidad no está normalizada, al utilizarla para evaluar el valor de expectación de **P** solamente se obtendrá una proporcionalidad, pero será suficiente. Esto es, se tendrá

$$\bar{\mathbf{p}} \propto \int \Psi^*(-e\mathbf{r})\Psi \, d\tau \propto \int \Psi^* e\mathbf{r} \Psi \, d\tau$$

o

$$\bar{\mathbf{p}} \propto \int \psi_f^* \mathbf{er} \psi_f \, d\tau + \int \psi_i^* \mathbf{er} \psi_i \, d\tau + e^{i(E_i - E_f)t/\hbar} \int \psi_i^* \mathbf{er} \psi_f \, d\tau + e^{-i(E_i - E_f)t/\hbar} \int \psi_f^* \mathbf{er} \psi_i \, d\tau$$

donde se ha "emparedado" el término **er** entre los otros términos de los integrandos de acuerdo con la notación aceptada y donde las integrales son tridimensionales. Las dos primeras integrales del segundo miembro no están asociadas con el vector $\bar{\mathbf{p}}$ ya que ambas son cero. Las dos últimas integrales, cada una de las cuales está multiplicada por exponenciales complejas con una dependencia temporal que oscila con frecuencia $\nu = (1/2\pi)(E_i - E_f)/\hbar = (E_i - E_f)/h$. Estos dos términos describen oscilaciones en el valor de expectación del momento eléctrico dipolar cuya amplitud se mide por la magnitud de la integral en cualquiera de los términos. Por lo tanto, se encuentra que la amplitud del momento eléctrico dipolar oscilante es proporcional a la cantidad p_{fi}, donde

$$p_{fi} \equiv \left| \int \psi_f^* \mathbf{er} \psi_i \, d\tau \right| \tag{8-42}$$

A esta cantidad se le llama *el elemento de matriz del momento eléctrico dipolar tomado entre los estados inicial y final.* Obsérvese que su valor depende del comportamiento del átomo tanto en su estado inicial, a través de ψ_i, como de su estado final, a través de ψ_f^*. Esto es razonable debido a que el átomo radiante es una mezcla de dos estados. Haciendo p proporcional a p_{fi}, en (8-40), se obtiene

$$R \propto \frac{\nu^3 p_{fi}^2}{\epsilon_0 h c^3}$$

donde **R** es la razón de transición.

Con argumentos parcialmente clásicos se han obtenido en la expresión para las razones de transición los factores ν^3 y p_{fi}^2, así como las constantes $\epsilon_0 h c^3$. Un argumento mucho más sofisticado que utiliza solamente la mecánica cuántica de Schrödinger conduce al mismo resultado excepto que se determina la proporcionalidad.

$$R = \frac{16\pi^3 \nu^3 p_{fi}^2}{3\epsilon_0 h c^3} \tag{8-43}$$

Es posible derivar la misma ecuación de una manera aún más definida, usando la teoría de la *electrodinámica cuántica,* la cual proporciona un tratamiento exacto de las propiedades de cuantización de los campos electromagnéticos. No obstante que los resultados no son diferentes, la electrodinámica cuántica proporciona una descripción más completa de la emisión de fotones por átomos excitados. En particular, se explica cómo el átomo radiante se encuentra en estados mezclados, lo cual ocurre mediante un tipo de interacción resonante entre las vibraciones de la frecuencia apropiada de un campo circundante de radiación electromagnética y un átomo en el estado inicial. La interacción induce oscilaciones de la carga a esta frecuencia que es característica del estado mezclado y, en consecuencia, el átomo emite radiación electromagnética de la misma frecuencia. En la figura 8-13 se muestra este proceso de manera esquemática.

La emisión de fotones por átomos bajo la influencia de los fotones que constituyen un campo electromagnético *aplicado* al átomo, es un fenómeno llamado *emisión estimulada.* Los átomos

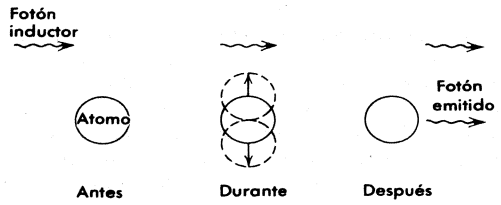


FIGURA 8-13
Ilustración esquemática de la emisión de un fotón por un átomo. La radiación electromagnética que incide sobre el átomo induce oscilaciones dipolares en él, y este emite radiación electromagnética.

también emiten fotones cuando *no existe* campo electromagnético aplicado y a este fenómeno se le llama *emisión espontánea*. La electrodinámica cuántica demuestra que la emisión espontánea ocurre debido a que siempre existe algún campo electromagnético presente en la vecindad del átomo, ¡Aún si no hay campo aplicado!. La razón es que el campo electromagnético tiene un contenido de energía que está *cuantizado* debido a que la energía, a una frecuencia particular, está dada por el *número* de fotones con esa frecuencia. Como cualquier otro sistema con energía cuantizada de manera discreta, el campo electromagnético tiene una *energía del punto cero*. Por lo tanto, la electrodinámica cuántica demuestra que siempre existirán algunas vibraciones del campo electromagnético presente, con la frecuencia necesaria para inducir las oscilaciones de la carga que causen que el átomo radie "espontáneamente". Se puede ver que tanto la emisión espontánea como la estimulada son cualitativamente similares. En la emisión espontánea, el campo que circunda al átomo se encuentra en el estado de energía de su punto cero. En la emisión estimulada se aplica un campo adicional tal que el campo electromagnético que rodea al átomo se encuentra en un estado de energía mayor. Por lo tanto, están presentes vibraciones de la frecuencia necesaria de mayor intensidad y existe más probabilidad de que el átomo sea estimulado para irradiar.

De este argumento resulta obvio que la razón de transición para emisión estimulada es proporcional a la intensidad del campo electromagnético aplicado; de esta manera, para campos intensos se hace muy grande y el átomo radía muy eficientemente. Lo cual tiene consecuencias prácticas importantes en el *laser*, dispositivo que produce haces extremadamente brillantes de luz coherente y que se estudiará en el capítulo 11, en donde se verá con más profundidad las relaciones entre las emisiones estimuladas y espontáneas mientras que aquí sólo se considerará la emisión espontánea.

La razón de transición para emisión espontánea evaluada en la ecuación (8-43) es independiente de la aplicación de un campo externo y sólo depende de las propiedades de las eigenfunciones atómicas. Puesto que las eigenfunciones son conocidas, los elementos de matriz del momento eléctrico dipolar entre los distintos pares de niveles, se pueden obtener calculando los valores de la integral asociada (8-42) y las razones de transición entre estos niveles se pueden calcular de (8-43).

Aún cuando los ritmos de transición varíen apreciablemente de un caso al siguiente, se encuentra una gran concordancia entre las predicciones y las medidas. Para las transiciones del átomo de hidrógeno de su primer estado excitado a su estado base, la razón de transición tiene el valor $R \simeq 10^8\ \text{seg}^{-1}$ lo cual significa que en aproximadamente 10^{-8} seg la probabilidad de que ocurra la transición es prácticamente igual a uno, es decir, el primer estado excitado tiene un *tiempo de vida* $t = 1/R \simeq 10^{-8}$ seg. Este es un valor que tipifica los órdenes de magnitud que se encuentran en las razones de transición atómicos, excepto que entre ciertos pares de niveles son prácticamente cero, dando origen a líneas espectrales muy débiles o incluso no observables. En esos casos las razones de transición son iguales a cero debido a que la integral en el elemento de matriz del momento eléctrico dipolar es justamente cero. Por lo tanto *las reglas de selección son conjuntos de condiciones sobre los números cuánticos de las eigenfunciones de los niveles de energía inicial y final, así que los elementos de matriz del dipolo eléctrico son cero cuando se calculan con un par de eigenfunciones cuyos números cuánticos violan estas condiciones.*

Ejemplo 8-6. Cuando se coloca un átomo de hidrógeno en un campo magnético externo muy intenso, el acoplamiento de interacción spin-órbita de su impulso angular orbital **L** y su impulso angular de spin **S** es tremendo y ambos vectores preceden independientemente alrededor de la dirección del campo externo manteniendo constantes sus componentes z: $L_z = m_l h$ y $S_z = m_s \hbar$; es decir, bajo estas circunstancias m_l y m_s son buenos números cuánticos. Las medidas hechas sobre los espectros de tales átomos muestran la existencia de una regla de selección $\Delta m_l = 0, \pm 1$. Obtenga esta regla de selección evaluando apropiadamente el elemento de matriz del dipolo eléctrico.

Escrito en forma explícita, el elemento de matriz es

$$p_{fi} = \left| \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_f^*(r,\theta,\varphi) e\mathbf{r} \psi_i(r,\theta,\varphi) r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi \right|$$

De estas integrales la que resulta interesante por conducir a la regla de selección es:

$$\mathbf{I} = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) \mathbf{r} \Phi_i(\varphi) \, d\varphi$$

Que es una cantidad vectorial que tiene las componentes:

$$I_x = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) x \Phi_i(\varphi) \, d\varphi$$

$$I_y = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) y \Phi_i(\varphi) \, d\varphi$$

$$I_z = \int_0^{2\pi} \Phi_f^*(\varphi) z \Phi_i(\varphi) \, d\varphi$$

Si se usan las relaciones

$$x = r \operatorname{sen}\theta \cos\varphi$$
$$y = r \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\varphi$$
$$z = r \cos\theta$$

que se pueden verificar examinando la figura 7-2 y se evalúan $\Phi_i(\varphi)$ y $\Phi_f^*(\varphi)$ de (7-19) se obtiene

$$I_x = r \operatorname{sen}\theta \int_0^{2\pi} \cos\varphi e^{i(m_{l_i} - m_{l_f})\varphi} \, d\varphi$$

$$I_y = r \operatorname{sen}\theta \int_0^{2\pi} \operatorname{sen}\varphi e^{i(m_{l_i} - m_{l_f})\varphi} \, d\varphi$$

$$I_z = r \cos\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m_{l_i} - m_{l_f})\varphi} \, d\varphi$$

En cualquier tabla de integrales definidas se puede ver que la integral en I_z es igual a cero, a menos que

$$m_{l_i} - m_{l_f} = 0 \qquad \text{o} \qquad \Delta m_l = 0$$

Y la integral en I_x se puede escribir en la forma:

$$I_x = \frac{1}{2} r \operatorname{sen}\theta \int_0^{2\pi} [e^{i(m_{l_i} - m_{l_f} - 1)\varphi} + e^{i(m_{l_i} - m_{l_f} + 1)\varphi}]\, d\varphi$$

Cuya integral es igual a cero, a menos que

$$m_{l_i} - m_{l_f} = \pm 1 \qquad \text{o} \qquad \Delta m_l = \pm 1$$

De la integral en I_y se obtiene el mismo resultado. Por lo tanto, a menos que $\Delta m_l = 0$, o ± 1, las componentes de **I** serán iguales a cero y puesto que esto también es cierto para los elementos de matriz del dipolo eléctrico, lo que se ha obtenido es la regla de selección. ◀

Físicamente, las reglas de selección provienen de las propiedades de simetría de la distribución de carga oscilante del átomo. El átomo no puede radiar como un dipolo eléctrico, a menos que el momento dipolar eléctrico de su distribución electrónica esté oscilando. Una analogía clásica de esto es la de una antena muy corta alimentada con fuentes de corriente alterna de muy alta frecuencia, tal y como se ilustra en la figura 8-14. Si los extremos de la antena se alimentan fuera de fase, de modo que la carga fluya hacia un extremo al mismo tiempo que fluye hacia el otro, la antena radiará con relativa eficiencia, pero si se la alimenta en fase, de modo que la carga fluya en ambas secciones hacia adentro o hacia afuera al unísono, entonces prácticamente no radiará.

Las propiedades de simetría de las eigenfunciones en los elementos de matriz son los responsables desde el punto de vista matemático de las reglas de selección. De una manera simple, se puede obtener alguna idea sobre esto si se consideran las *paridades* de las eigenfunciones. En la sección 6-8 se definió la paridad de una eigenfunción unidimensional como la cantidad que describe el comportamiento de la eigenfunción cuando se cambia el signo de

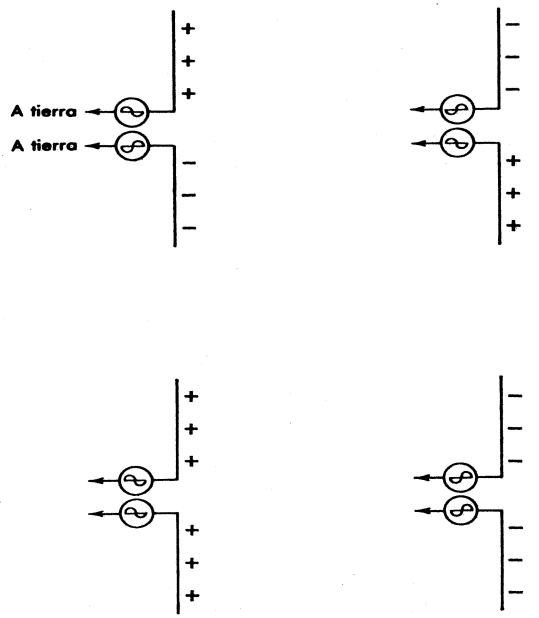


FIGURA 8-14
Diagramas de *arriba:* Antena alimentada centralmente y fuera de fase. Diagrama de *abajo*: Alimentación en fase. Diagramas de la *izquierda*: Se muestra la distribución de carga para un instante inicial. Diagramas de la *derecha:* Medio período mas tarde. La antena alimentada en fase emitirá muy poca radiación si su longitud es corta comparada con la longitud de onda y si la distancia a la tierra es grande comparada con la longitud de onda.

la coordenada, esta definición se puede extender fácilmente a tres dimensiones, si se pide que las eigenfunciones satisfagan la relación:

$$\psi(-x,-y,-z) = +\psi(x,y,z) \tag{8-44}$$

en cuyo caso se habla de *paridad par*, y para las funciones que satisfagan la relación

$$\psi(-x,-y,-z) = -\psi(x,y,z) \tag{8-45}$$

se dice que tienen *paridad impar*. Todas las eigenfunciones con estados ligados que son soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial que se puede escribir como $V(r)$, por ejemplo, el potencial de Coulomb, tienen paridades definidas ya sean pares o impares. La razón para esto es que las densidades de probabilidad $\psi^*\psi$ tendrán el mismo valor en el punto $(-x,-y,-z)$ que en el punto (x,y,z) lo cual es una exigencia del hecho de que el potencial tiene el mismo valor para esos puntos.

Un ejemplo de lo anterior son las eigenfunciones del átomo con un solo electrón que se presentan en la tabla 7-2. Examinando la figura 8-15 se puede ver que cuando se cambian los signos de las coordenadas rectangulares el comportamiento de las coordenas polares esféricas es:

$$r \to r, \qquad \theta \to \pi - \theta, \qquad \varphi \to \pi + \varphi \tag{8-46}$$

Utilizando estas relaciones en varias de las eigenfunciones, es fácil demostrar que

$$\psi_{nlm_l}(r,\pi - \theta,\pi + \varphi) = (-1)^l \psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) \tag{8-47}$$

La paridad está determinada por $(-1)^l$*; es par si el número cuántico de impulso angular orbital (l) es par, e impar si l es impar.* Esto es cierto para *todas* las eigenfunciones, sean o no ligadas, de cualquier potencial $V(r)$ esféricamente simétrico, ya que la única suposición importante que se ha hecho para obtener la ecuación (8-47) es que V se puede escribir como $V(r)$.

Ahora considérese el elemento de matriz del momento dipolar eléctrico

$$p_{fi} = \left| \int \psi_f^* e\mathbf{r} \psi_i \, d\tau \right|$$

La paridad de $e\mathbf{r}$ es impar ya que el vector $\mathbf{r}$ pasa a ser su negativo cuando se cambia el signo de las coordenadas rectangulares y, por lo tanto, si las eigenfunciones inicial y final ψ_i y ψ_f son de

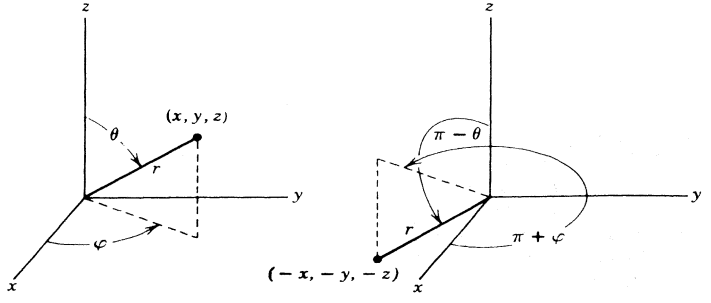


FIGURA 8-15
Ilustración de la operación de paridad.

la misma paridad, ya sean ambas par o impar, el integrando completo tendrá paridad impar. Siendo éste el caso, la integral será igual a cero debido a que la contribución de cualquier elemento de volumen será cancelada por la contribución del elemento de volumen diametralmente opuesto y por tanto la razón de transición también será igual a cero. En consecuencia, la paridad de la eigenfunción final diferirá de la paridad de la eigenfunción inicial en el caso de una transición eléctrica dipolar y ya que las paridades están determinadas por $(-1)^l$, es fácil entender porqué las transiciones para $\Delta l = 0$, o ± 2, no son permitidas según la regla de selección (8-37), $\Delta l = \pm 1$. La razón es que en esas transiciones, las paridades de las eigenfunciones inicial y final serían las mismas.

En la electrodinámica cuántica se muestra, y los experimentos lo verifican, que un fotón posee tanto impulso angular, como impulso lineal y en particular, la teoría demuestra que el impulso angular que tiene un fotón emitido en una transición eléctrica dipolar es igual a 1, en unidades de $\hbar$. Desde este punto de vista, la regla de selección (8-38) $\Delta j = 0, \pm 1$ para el número cuántico de impulso angular total, representa los requisitos de conservación del impulso angular lo cual fundamentalmente es una propiedad de simetría que limita las transiciones de dipolo eléctrico a pares de estados en los que el cambio en el impulso angular total del átomo se puedan compensar mediante el impulso angular del fotón emitido. (Cuando $\Delta j = 0$ se satisface la conservación del impulso angular mediante un cambio en la orientación del vector de impulso angular total del átomo al mismo tiempo que se emite el fotón). Desde este punto de vista también resulta evidente que la transición eléctrica dipolar con $\Delta l = \pm 3$ no puede ocurrir debido a que ésta implica un cambio muy grande en el impulso angular total, aunque en lo que concierne a la paridad no existe prohibición alguna.

Resulta conveniente mencionar que las reglas de selección no prohiben de manera absoluta las transiciones que las violan, sino que simplemente indican que es muy poco probable la ocurrencia de ellas. Si una transición no puede ocurrir mediante los medios de emisión de radiación normales de un momento eléctrico dipolar oscilante, existe una probabilidad muy pequeña (típicamente reducida por un factor de alrededor de 10^{-4}) de que ocurra mediante la emisión de radiación de un momento magnético dipolar oscilante, lo cual debe ocurrir por oscilaciones en la orientación del impulso angular de spin del electrón y del momento magnético dipolar. Las transiciones también pueden ocurrir con probabilidades muy pequeñas (aproximadamente reducidas por un factor 10^{-6}) mediante la emisión de radiación de un momento cuadrupolar eléctrico oscilante lo cual involucra oscilaciones entre un elipsoide prolado y un elipsoide oblado en la distribución de carga del átomo.

Si un átomo se encuentra en un estado excitado desde el cual sólo puede regresar a su estado base mediante una de estas transiciones altamente inhibidas, deberá permanecer en el estado excitado por una fracción apreciable de segundo, en vez del tiempo de vida de 10^{-8} seg que corresponde a una razón de transición típica de 10^8 seg^{-1}. Entonces se dice que el estado excitado es *metaestable* y que la emisión retrasada de un fotón es una forma de fosforescencia. En la práctica, es muy raro observar la *fosforescencia* de los átomos debido a que el estado metaestable se desexcita sin la emisión de un fotón cuando el átomo choca con la pared del recipiente y cede su exceso de energía directamente a los átomos de la pared. Sin embargo, es muy común observar en los núcleos un proceso completamente análogo a la fosforescencia.

8.8 Comparación entre las teorías cuánticas antigua y moderna

Resumiremos muy brevemente los últimos capítulos haciendo una comparación entre las teorías cuánticas modernas (Schrödinger, Dirac y la electrodinámica cuántica) y las teorías cuánticas antiguas (Bohr y Sommerfeld).

Uno de los aspectos más importantes de las teorías cuánticas modernas es la forma en la que ellas han llegado a atacar el problema del átomo de hidrógeno con tratamientos cada vez mas precisos. La teoría de Schrödinger sin el spin del electrón da cuenta de los niveles de energía del

átomo que se han observado en mediciones espectroscópicas realizadas con una resolución moderada ya que las mediciones realizadas con una gran resolución revelan el desdoblamiento en estructura fina de los niveles de energía, los cuales se pueden explicar casi completamente añadiendo a la teoría de Schrödinger las correcciones para la interacción spin-órbita y para la dependencia relativista de la masa con la velocidad. Mismas que se pueden explicar completamente mediante la teoría de Dirac. Mediciones espectroscópicas con una resolución muy alta muestran el corrimiento Lamb, el cual se puede entender en términos de la electrodinámica cuántica. Mediciones con resolución extremadamente alta muestran los desdoblamientos hiperfinos, de los cuales se puede dar cuenta con la teoría de Schrödinger si se incluye una interacción que considere al spin nuclear. Otro gran éxito de las teorías cuánticas modernas es su habilidad para dar tratamientos muy satisfactorios a las razones de transición y a las reglas de selección observadas en las mediciones de los espectros emitidos tanto por los átomos de hidrógeno como por todos los otros átomos monoelectrónicos y multielectrónicos.

El balance de la teoría cuántica antigua es irregular. El modelo de Bohr conduce a valores correctos para las energías de los niveles simples del átomo de hidrógeno, las modificaciones relativistas de Sommerfeld concuerdan con los desdoblamientos de estructura fina del hidrógeno pero esta concordancia es accidental, ya que estas modificaciones relativistas no pueden explicar ni el corrimiento Lamb ni los desdoblamientos hiperfinos. Además, la discrepancia es por varios órdenes de magnitud cuando se le compara con los desdoblamientos de estructura fina en el caso de átomos multielectrónicos. De hecho, el modelo de Bohr falla completamente al explicar muchas de las propiedades mas obvias de los niveles de energía de átomos multielectrónicos; por ejemplo, se ve en serios aprietos con el átomo de helio que contiene tan sólo dos electrones. La teoría cuántica antigua no es confiable cuando se explican las reglas de selección e incapaz de explicar las razones de transición.

Un hecho particularmente reanimante de la teoría de Schrödinger es que casi todo el trabajo realizado para aplicarla a átomos con un solo electrón es transferible directamente a átomos multielectrónicos y la teoría es lo suficientemente precisa como para explicar los detalles importantes de éstos últimos. Además, no es mucho más complicado el aplicar la mecánica cuántica de Schrödinger a estos átomos de lo que lo es el aplicarla a átomos monoelectrónicos. Como se verá en los dos capítulos siguientes, una prueba de que esto es cierto, está en que la mayoría de los electrones en un átomo multielectrónico se agrupan con otros para formar capas simétricas e inertes en las cuales no es necesario tratarlos individualmente y solamente aquellos pocos electrones que no se encuentran en tales capas requieren de un tratamiento detallado.

PREGUNTAS

1. ¿Por qué cuando se estudiaron las figuras 8-1 y 8-4 se habló de polos magnéticos ficticios?

2. ¿Por qué el impulso rotativo que actúa sobre un dipolo magnético cuando éste se encuentra en un campo magnético ocasiona que el dipolo preceda alrededor del campo en vez de alinearse con éste?

3. Explique por qué no es posible realizar el experimento de Stern-Gerlach con un electrón libre para medir su momento magnético dipolar de spin y solamente es posible si el electrón se encuentra en un átomo neutro (Sugerencia: existe una respuesta superficial que tiene una refutación superficial. Una respuesta completa involucra el principio de incertidumbre).

4. ¿Por qué se concluyó que los números cuánticos de spin son semienteros?

5. ¿Es válida la crítica a la mecánica cuántica de Schrödinger por el hecho de no predecir el spin del electrón?

6. ¿Existen dificultades conceptuales con la idea de un electrón puntual?

7. ¿Es el electrón la "partícula magnética mínima"?

8. Explique de manera sencilla por qué un electrón en un átomo de hidrógeno experimenta un campo magnético. ¿Lo experimenta en todos los estados cuánticos?

9. ¿Qué es la interacción spin-órbita? ¿Qué tiene que ver ésta con el desdoblamiento de estructura fina observado en las líneas espectrales del átomo de hidrógeno?

10. En algunas ocasiones cuando se toma en cuenta la interacción spin-órbita se dice que m_l y m_s ya no son "buenos números cuánticos". Explique ¿por qué esta terminología es apropiada? ¿Cuándo se toma en cuenta la interacción spin-órbita? ¿Cuáles son los buenos números cuánticos para el átomo monoelectrónico?

11. ¿Cuáles son los buenos números cuánticos para un átomo monoelectrónico en un campo magnético externo que resulta muy débil comparado con el campo interno? y ¿Cuándo es extremadamente intenso?

12. ¿Por qué la interacción spin-órbita es particularmente sensible a la forma del potencial $V(r)$ para r pequeña, y cómo se puede usar esto para estudiar experimentalmente los potenciales de átomos multielectrónicos?

13. ¿Cuál es la justificación para realizar la adición de vectores, como se muestra en la figura 8-10, con vectores cuyas longitudes son proporcionales a los números cuánticos que especifica los impulsos angulares en vez de hacerlo con los vectores de impulso angular mismos?

14. Describa brevemente todos los detalles del diagrama de niveles de energía representado en la figura 8-11 y explique el origen de ellos. ¿Cuáles son los detalles que no se muestran?

15. ¿Puede existir radiación electromagnética emitida por un monopolo eléctrico oscilante? (es decir, emitida por una carga localizada en un punto fijo y cuya magnitud oscila).

16. Existen similitudes entre la emisión de radiación electromagnética por un sistema de cargas oscilantes y la emisión de radiación gravitacional por un sistema de masas oscilantes, pero no es posible la emisión de radiación gravitacional dipolar. ¿Por qué?

17. ¿Qué evidencia experimental conoce Ud. que esté en contra de la energía de vibración del punto cero del campo electromagnético, y cuál que esté a favor?

18. ¿Cuál es la relación entre emisión espontánea y emisión estimulada?

19. Explique en términos físicos el origen de las reglas de selección.

20. ¿A todos los átomos les lleva el mismo tiempo realizar una transición entre cierto par de niveles?

PROBLEMAS

1. Evaluar el campo magnético producido por una espira de corriente de forma circular en un punto sobre el eje de simetría lejano al plano de la espira. Evaluar, a continuación el campo magnético producido en el mismo punto por un dipolo formado por dos monopolos magnéticos separados, localizados en el centro de la espira y a lo largo del eje de simetría. Demostrar que los campos son los mismos si la corriente en la espira y su área están relacionadas con el momento magnético del dipolo mediante (8-2). ¿Podría indicar el modo de extender el argumento para demostrar que los campos serán los mismos para todos los puntos distantes de la espira o del dipolo e independiente de la forma de la espira?

2. (a) Evaluar la relación del momento magnético dipolar orbital al impulso angular orbital, μ_l/L, para un electrón que se mueve en una órbita elíptica del átomo de Bohr-Sommerfeld que se analizó en la sección 4-10. (Sugerencia: el área barrida por el radio vector de longitud r cuando la coordenada angular aumenta en $d\theta$, es $dA = r^2\, d\theta/2$. Usese $L = mr^2\, d\theta/dt$ para evaluar $d\theta$ en términos

del incremento en el tiempo dt, y entonces realice la integración trivial). (b) Compare los resultados con los de (8-5) para una órbita circular.

3. Se lanza un haz de átomos de hidrógeno en su estado base a través de un imán Stern-Gerlach, dicho haz se desdobla en dos componentes de acuerdo con las dos orientaciones del spin. A una de las componentes se le detiene mediante un diagrama colocado a la salida del imán mientras que la otra componente continúa hacia un segundo imán Stern-Gerlach, que es coaxial con el haz que emerge del primer imán pero que está girado con un ángulo α respecto al primer imán. A la salida del segundo imán, existe un segundo diafragma que al igual que el anterior sólo permite el paso de una componente. Describir cualitativamente la dependencia de la intensidad del haz que pasa el segundo diafragma con α.

4. Determinar el gradiente de campo de un imán Stern-Gerlach de 50 cm. de longitud que es capaz de producir 1 mm de separación entre las dos componentes de un haz de átomos de plata emitido con una energía cinética típica desde un horno a 960°C. El momento magnético dipolar de la plata es como en el caso del hidrógeno debido a un sólo electrón $l = 0$.

5. Si se coloca a un átomo de hidrógeno en un campo magnético que es muy intenso comparado con el campo interno, los momentos magnéticos dipolares orbital y de spin se preceden de manera independiente alrededor del campo externo y sus energías dependen de los números cuánticos m_l y m_s, los cuales especifican sus componentes a lo largo de la dirección del campo externo. (a) Evaluar el desdoblamiento de los niveles de energía de acuerdo con los valores de m_l y m_s. (b) Hacer el esquema de los niveles desdoblados (subniveles) que se originan por el nivel $n = 2$, enumerando los números cuánticos para cada una de las componentes del esquema. (c) Calcular la intensidad del campo magnético externo que sería capaz de producir una diferencia de energía entre los niveles $n = 2$ más separados, que fuera igual a la diferencia entre las energías de los niveles $n = 1$ y $n = 2$ en ausencia de campo.

6. La precesión de Thomas también se puede describir en términos de una dilación del tiempo entre el sistema de referencia en el cual el núcleo está en reposo y el sistema en el cual el electrón está instantáneamente en reposo, lo cual conduce a un desacuerdo entre un observador en el núcleo y los observadores en los electrones, ya que existirá una diferencia en el tiempo necesario para cada uno para completar una revolución alrededor del otro. Discuta los detalles de esta descripción y compare con los resultados del apéndice **J**.

7. Usese el procedimiento del ejemplo 8-3 para estimar la energía de interacción spin-órbita en el estado $n = 2$, $l = 1$ de un átomo muónico, definido en el ejemplo 4-9.

8. Demostrar que los únicos valores posibles del número cuántico j para la serie $j = l + 1/2$, $l - 1/2$, $l - 3/2$,..., que satisfacen la desigualdad $\sqrt{j(j+1)} \geq |\sqrt{l(l+1)} - \sqrt{s(s+1)}|$ con $s = 1/2$, son $j = l + 1/2$, $l - 1/2$, si $l \neq 0$, o $j = 1/2$ si $l = 0$.

9. (a) Enumerar los valores posibles de j y m_j, para los estados en los cuales $l = 1$ y, por supuesto $s = 1/2$. (b) Hacer un esquema de los "modelos vectoriales" correspondientes. (c) Hacer una figura en la que se ilustren los vectores de impulso angular para un caso típico. (d) Mostrar también los vectores de momento magnético dipolar orbital y de spin y su suma del vector momento magnético dipolar total. (e) ¿Es el vector momento magnético dipolar total antiparalelo al vector impulso angular total?

10. Enumerar los valores posibles de j y m_j para estados en los cuales $l = 3$ y $s = 1/2$.

11. El corrimiento relativista en los niveles de energía de un átomo de hidrógeno debido a la dependencia relativista de la masa con la velocidad se puede determinar utilizando las eigenfunciones atómicas para calcular el valor de expectación $\overline{\Delta E_{\text{rel}}}$ de la cantidad $\Delta E_{\text{rel}} = E_{\text{rel}} - E_{\text{clas}}$, que es la diferencia entre las expresiones relativista y clásica para la energía total E. Demostrar que para p no muy grande

$$\Delta E_{\text{rel}} \simeq -\frac{p^4}{8m^3c^2} = -\frac{E^2 + V^2 - 2EV}{2mc^2}$$

así que

$$\overline{\Delta E_{\text{rel}}} = -\frac{E_n^2}{2mc^2} - \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2mc^2}\int \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r^2}\psi_{nljm_j}\,d\tau$$
$$-\frac{E_n e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}\int \psi^*_{nljm_j}\frac{1}{r}\psi_{nljm_j}\,d\tau$$

12. (a) Hacer un diagrama de los niveles de energía para todos los estados $n = 2$ de manera similar a la parte derecha de la figura 8-11 pero mostrando también el desdoblamiento según l. (b) Muestre, mediante flechas que conecten los pares de niveles, todas las transiciones que están permitidas para las reglas de selección.

13. Verificar que las paridades de las eigenfunciones ψ_{300}, ψ_{310}, ψ_{320}, y ψ_{322} del átomo monoelectrónico están determinadas por $(-1)^l$.

14. (a) Demostrar, utilizando condiciones de paridad, que las primeras dos integrales de la ecuación que precede a (8-42) son nulas. (b) Interpretar el significado de la existencia de los momentos dipolares eléctricos del átomo que son estáticos en el tiempo.

15. Mediante una evaluación directa de los elementos de matriz del dipolo eléctrico para las eigenfunciones de la tabla 7-2, demostrar que la regla de selección $\Delta l = \pm 1$ de (8-37) es válida para la transición $n = 2 \rightarrow n = 1$ del átomo de hidrógeno.

16. Considere los elementos de matriz del momento eléctrico dipolar de un oscilador armónico cargado, que efectúa las transiciones $n_i = 3$, $n_f = 0$; $n_i = 2$, $n_f = 0$; $n_i = 1$, $n_f = 0$. Usar las eigenfunciones de la tabla 6-1 para mostrar que los elementos de matriz que son distintos de cero obedecen la regla de selección $\Delta n = \pm 1$, que se estudió en la sección 4-11. (Sugerencia: siempre que pueda utilice las consideraciones de paridad).

17. Calcular la razón para transiciones espontáneas entre los estados $n = 1$ y $n = 0$ de un oscilador armónico simple con carga e. Considere la masa del oscilador igual a la masa de un átomo de alguna molécula iónica típica y la constante de la fuerza restauradora igual a 10^3 joule/m^2, que corresponde al valor para una molécula de este tipo. (Sugerencia: normalice las eigenfunciones que vaya a utilizar). (b) A partir de la razón de transición, estimar el tiempo promedio necesario para completar la transición. Este es el tiempo de vida del estado vibracional $n = 1$ de esta molécula.

18. Considere suficientes elementos de matriz del momento eléctrico dipolar para una partícula cargada en un pozo de potencial cuadrado infinito y utilice las eigenfunciones de la sección 6-8 para ver si existe una regla de selección para este sistema y de ser así, determine la regla de selección.

9

Atomos multielectrónicos Estados base y excitaciones de rayos X

9.1 Introducción 355

Procedimiento a utilizarse en el análisis de un sistema complicado por una serie de pasos no muy complicados.

9.2 Partículas idénticas 356

Relación con átomos multielectrónicos; distinguibilidad de partículas idénticas en física clásica; indistinguibilidad en la física cuántica; ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para dos partículas idénticas sin interacción; necesidad de y dificultad en etiquetar partículas; eigenfunciones cuyas densidades de probabilidad no se alteran al reetiquetar; eigenfunciones simétricas y antisimétricas para dos partículas idénticas e independientes en una caja; ortogonalidad.

9.3 El principio de exclusión 362

Afirmaciones de principio, débil y fuerte; determinantes de Slater; fermiones y bosones; relación entre spin y simetría.

9.4 El átomo de helio y las fuerzas de intercambio 365

Separación de las eigenfunciones espacial y de spin para dos electrones sin interacción; forma general de las eigenfunciones espaciales simétricas y antisimétricas; formas específicas de la eigenfunción de spin antisimétrica de singulete y de las eigenfunciones spin simétricas y de triplete; spin total; números cuánticos s' y m'_s; interpretación geométrica de los estados de spin singulete y triplete. Correlación entre coordenadas espaciales y de spin; fuerzas de intercambio; estados excitados profundos del helio; el estado base del helio y el descubrimiento del principio de exclusión por Pauli.

9.5 Teoría de Hartree **374**

Necesidad de tratar a los electrones como moviéndose independientemente en un potencial neto; determinación autoconsistente del potencial atómico neto; procedimiento de Hartree; cálculo de Fock.

9.6 Resultados de la teoría de Hartree **378**

Dependencia angular de la eigenfunción del átomo multielectrónico; densidades de probabilidad radial y total; resultados del átomo de argón; capas; Z efectiva; apantallamiento; descripción de las energías y radios de las capas utilizando Z efectiva en las ecuaciones del átomo con un electrón; dependencia en l de las energías del átomo; su origen físico; subcapas.

9.7 Estados base de átomos multielectrónicos y la tabla periódica **385**

Significado de la tabla periódica; ordenamiento en energías de subcapas externas llenas; notación espectroscópica; configuración electrónica; construcción de la tabla periódica en base al principio de incertidumbre; configuraciones excepcionales; origen de las propiedades de los gases nobles, alcalinos, halógenos, elementos de transición, lantánidos y actínidos; energía de ionización; afinidad electrónica.

9.8 Espectros de líneas de rayos-X **393**

Tubos de rayos-X; producción de espectros de líneas; agujeros; niveles de energía de rayos-X; notación de rayos-X; reglas de selección; estimaciones de la longitud de onda de rayos-X en base a la Z efectiva, su interpretación, y relación con el experimento de Moseley; determinación del número atómico; absorción y umbral de absorción de rayos-X.

Preguntas **399**

Problemas **401**

9

Atomos multielectrónicos Estado base y excitaciones de rayos X

9.1 Introducción

En este capítulo, se utilizará la mecánica cuántica de Schrödinger para estudiar átomos multielectrónicos desde el helio hasta el uranio. Primero se estudiarán, de modo general, las propiedades interesantes de sistemas cuánticos de partículas idénticas, tales como electrones, que conducirán al llamado principio de exclusión, que tiene una importancia primordial en la determinación de la estructura de átomos multielectrónicos. Enseguida, se considerarán los estados base de átomos multielectrones, y la descripción sistemática de estos, que se obtiene de la tabla periódica de los elementos. Se verá que con base en la mecánica cuántica se obtiene una explicación completa de la tabla periódica, que constituye la base de la química inorgánica y de una buena parte de la química orgánica y la física del estado sólido. Finalmente, se considerarán los estados excitados de alta energía de átomos multielectrónicos involucrados en la emisión de rayos X de estos átomos.

Un átomo multielectrónico de número atómico Z, contiene un núcleo de carga $+e$ rodeado de Z electrones, cada uno de carga $-e$. Cada electrón se mueve bajo la influencia de una interacción de Coulomb atractiva ejercida por el núcleo, y una interacción de Coulomb repulsiva debida a los $Z-1$ electrones restantes, así como también algunas otras interacciones débiles en las que el impulso angular se halla implicado. El tratamiento cuántico de este complicado sistema es más fácil de lo que podría suponerse. Una de las razones es que las diversas interacciones sobre un electrón atómico son de intensidad diferente, de modo que es posible tomarlas en cuenta por partes, una, dos o más, de mayor o menor intensidad. El primer paso, que es el que se considera en este capítulo, consiste en desarrollar una descripción aproximada que sólo toma en cuenta las interacciones más fuertes. Los pasos siguientes, que se considerarán en el siguiente capítulo, consisten en hacer la descripción cada vez más exacta tomando en cuenta sucesivamente, las interacciones más débiles. Mediante este procedimiento no es difícil entender cualitativamente, el comportamiento de átomos multielectrónicos.

Por este método aproximado, también se puede obtener información cuantitativa respecto a los átomos multielectrónicos pero los cálculos que se requieren deben realizarse en computadoras grandes y desde luego, no se reproducirán aquí. Sin embargo, en este capítulo y en el que sigue, dichos cálculos serán descritos y sus resultados analizados y comparados con las propiedades de átomos multielectrónicos observadas experimentalmente. La mayor parte de esta descripción estará basada en la teoría de átomos con un electrón, que se desarrolló en los capítulos precedentes.

9.2 Partículas idénticas

Antes de iniciar el estudio de átomos multielectrónicos es necesario analizar un importante tópico de mecanica cuántica, que no se incluye en la teoría de los átomos con un electrón. Esto es, como elaborar una descripción mecánico-cuántica acertada de un sistema que contiene dos o más partículas *idénticas,* como electrones. El análisis de este problema conducirá a fenómenos cuánticos que no tienen, en absoluto, análogo clásico. De hecho, de este análisis se obtendrán algunas de las diferencias más sobresalientes entre la mecánica clásica y la cuántica.

La naturaleza de este problema se puede mostrar mediante un ejemplo específico. Considérese una caja que contiene dos electrones. Estas dos partículas idénticas se mueven dentro de la caja rebotando en sus paredes y ocasionalmente dispersándose entre sí. En una descripción clásica de este sistema, los electrones viajan en trayectorias bien definidas, de modo que la observación constante de este sistema, permite distinguir entre los dos electrones, a pesar de que son partículas idénticas. Por ejemplo, en física clásica se podría seguir el desarrollo de un sistema, sin perturbarlo, tomando una película de dicho sistema; si en algún cuadro de la película, se marca la imagen de uno de los electrones con 1, y se marca la imagen del otro electrón con 2, se podrá seguir el movimiento de los electrones en los cuadros subsiguientes y siempre se podrá establecer cuál de los electrones es el 1, y cuál el 2. El procedimiento se ilustra en la figura 9-1. Desde luego que los electrones en sí no pueden ser marcados como tampoco sería posible pintar uno de rojo y otro de verde. Los electrones son partículas idénticas (cualquier electrón es exactamente igual a cualquier otro electrón). Sin embargo, *en física clásica, las partículas idénticas pueden distinguirse entre sí, por procedimientos que en ninguna otra forma afectan su comportamiento, y por lo tanto, es posible poner marcas a las partículas.*

Esto no se puede realizar en mecánica cuántica, puesto que el principio de incertidumbre impide observar constantemente el movimiento de las partículas sin que se altere el comportamiento de las partículas. Como se vió en la sección 3-3 los fotones que deben utilizarse para iluminar la escena para la cámara de cine interactúan con los electrones de modo significativo

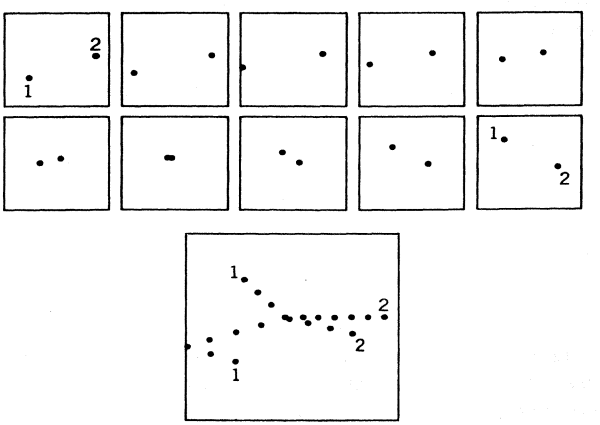


FIGURA 9-1

Arriba: Secuencia de diez cuadros de una película de dos electrones moviéndose en una caja, de acuerdo a la física clásica. Si se les asignara marcas a sus imágenes en el primer cuadro, no habría ambigüedad en asignar las mismas marcas a sus imágenes en cualquier cuadro subsecuente, a pesar de que se hiciera necesaria una amplificación o "cámara lenta". *Abajo:* Superposición amplificada de los diez cuadros, mostrando las trayectorias de los electrones.

pero impredecible. El comportamiento de los electrones es afectado seriamente por cualquier intento de distinguirlos.

De modo más formal, pero equivalente, se puede afirmar que en mecánica cuántica, la extensión finita de las funciones de onda asociadas con cada electrón puede conducir a un traslapamiento de estas funciones de onda que dificultan el hacer una distinción de qué función de onda se asocia con cuál electrón. El átomo de helio proporciona un buen ejemplo, ya que las funciones de onda de los dos electrones se **traslapan** fuertemente en todos los estados cuánticos y, por lo tanto, los electrones no pueden distinguirse. Existe también traslapamientos entre las funciones de onda del electrón y el protón en el átomo de hidrógeno, pero esto no conduce a dificultades en distinguir una partícula de la otra ya que el electrón y el protón no son idénticos (pueden distinguirse por su masa, carga, etc).

Puede verse que existe una distinción fundamental entre las descripciones cuántica y clásica de un sistema de partículas idénticas. El tratamiento exacto de estos sistemas debe formularse de modo tal que la *indistinguibilidad* de partículas idénticas se tome en cuenta explícitamente. Es decir, *los resultados mensurables que se obtengan de cálculos exactos mecánico cuánticos, no deben depender de la asignación de marcas a partículas idénticas.* Por sí misma, esta propiedad conduce a efectos importantes que no tienen analogía clásica, ya que la indistinguibilidad en sí es puramente mecánico-cuántica.

Como las eigenfunciones son las causantes de la descripción de los sistemas mecánico-cuánticos, debe buscarse alguna forma de escribirlas de modo tal que matemáticamente se expresen las ideas cualitativas desarrolladas anteriormente. Se continúa considerando dos partículas idénticas (es decir, dos electrones, dos protones, dos partículas α, o dos átomos de helio) en una caja. Para simplificar el estudio, se supondrá que las interacciones entre las partículas son despreciables, es decir, rebotarán de las paredes de la caja, pero no chocarán entre sí. A pesar de esta simplificación, los resultados de la siguiente discusión serán de validez general.

La ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para el sistema de dos partículas sin interacción en tres dimensiones, puede escribirse:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_T}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial z_1^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi_T}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2\psi_T}{\partial z_2^2}\right)+V_T\psi_T=E_T\psi_T \quad (9\text{-}1)$$

donde

m = la masa de cada partícula

x_1, y_1, z_1 = las coordenadas de la partícula 1

x_2, y_2, z_2 = las coordenadas de la partícula 2

Esta expresión puede obtenerse inmediatamente escribiendo la expresión clásica para la energía total del sistema, sustituyendo las cantidades dinámicas por sus operadores cuánticos asociados para obtener la ecuación de Schrodinger y separando después la parte dependiente del tiempo. No se incluirán aquí los detalles del procedimiento, ya que éste es una extensión simple del usado para obtener la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para una partícula en tres dimensiones, (7-10), y, además, la validez de (9-1) es en sí bastante obvia. Es más importante hacer notar que en (9-1), se utilizan marcas, que especifican la identidad de las partículas 1 y 2. El lenguaje de matemática obliga a usar esas marcas, ya que de otra manera se tendría una irremediable confusión; el autor reta a los estudiantes a que traten de escribir una ecuación sin ambigüedad, análoga a (9-1), sin que se utilicen marcas para las partículas. Al utilizar (9-1) claramente se tiene la oportunidad de poder violar el requisito mecánico-cuántico de indistinguibilidad. Más adelante se verá cómo sucede esto en la realidad, pero que es posible hacer rearreglos de tal modo que se evite esa dificultad. Lo anterior se realiza encontrando ciertas combinaciones lineales de eigenfunciones marcadas que conducen a predicciones medibles que son independientes de la asignación de marcas.

En la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, (9-1)

$$\begin{aligned} \psi_T(x_1, \ldots, z_2) &= \text{eigenfunción del sistema total} \\ V_T(x_1, \ldots, z_2) &= \text{energía potencial del sistema total} \\ E_T &= \text{energía total del sistema total} \end{aligned}$$

Como se ha supuesto que no hay interacción entre las dos partículas, las partículas se mueven *independientemente.* Entonces, la energía potencial del sistema total es simplemente la suma de las energías potenciales de cada partícula en su interacción con las paredes de la caja. Cada energía potencial dependerá solamente de las coordenadas de una partícula y, como las partículas son idénticas, las dos funciones de energía potencial son iguales. Por lo tanto,

$$V_T(x_1,\ldots,z_2) = V(x_1,y_1,z_1) + V(x_2,y_2,z_2) \tag{9-2}$$

Resulta fácil demostrar, aplicando la técnica de separación de variables, que para el potencial (9-2) existen soluciones de (9-1) de la forma:

$$\psi_T(x_1,\ldots,z_2) = \psi(x_1,y_1,z_1)\psi(x_2,y_2,z_2) \tag{9-3}$$

donde $\psi(x_1,y_1,z_1)$ y $\psi(x_2,y_2,z_2)$ satisfacen idénticas ecuaciones de Schrödinger de una partícula, independientes del tiempo. Obsérvese que la eigenfunción total se escribe como un *producto* de las dos eigenfunciones que describen el movimiento de las dos partículas *independientes.*

Cada una de las eigenfunciones que describe a las partículas requiere de tres números cuánticos para especificar la forma matemática de su dependencia con las tres coordenadas espaciales. Además, cada una requiere de un número cuántico adicional que especifique la orientación del spin de la partícula. Se simplificará la notación utilizando un solo símbolo: α, o β, o γ, etc.,para designar un conjunto particular de los cuatro números cuánticos requeridos para especificar los estados cuánticos espaciales y de spin de una de las partículas. Así, por ejemplo, α, está en lugar de cierto conjunto de valores de los cuatro números cuánticos. Entonces, una eigenfunción particular para la partícula 1, se escribirá:

$$\psi_\alpha(x_1,y_1,z_1)$$

Se puede acortar aún más la notación escribiendo lo anterior como

$$\psi_\alpha(1)$$

Esta eigenfunción contiene la información de que la partícula 1 se encuentra en los estados cuánticos espaciales y de spin descritos por α. En forma numérica, es la función de la forma especificada por ψ_α, evaluada en las coordenadas de la partícula 1. La eigenfunción correspondiente a la partícula 2, que se encuentra en el estado cuántico espacial y de spin β se escribiría

$$\psi_\beta(2)$$

La eigenfunción total $\psi_T(x_1,\ldots,z_2)$ para el caso en que la partícula 1 esté en el estado α, y la partícula 2 esté en el estado β, así

$$\psi_T(x_1,\ldots,z_2) = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \tag{9-4}$$

Una eigenfunción que indique que la partícula 1, está en el estado β y la partícula 2 está en el estado α, tendrá intercambiados los símbolos que indiquen los números cuánticos,

$$\psi_T(x_1,\ldots,z_2) = \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2) \tag{9-5}$$

En seguida se verá si las cantidades mensurables, que se evalúen de estas funciones de onda totales, dependen de la asignación de marcas a las partículas. La cantidad más sencilla de medir, es la densidad de probabilidad. Para la eigenfunción (9-4), ésto será

$$\psi_T^* \psi_T = \psi_\alpha^*(1)\psi_\beta^*(2)\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \tag{9-6}$$

y para la eigenfunción de (9-5) será

$$\psi_T^* \psi_T = \psi_\beta^*(1)\psi_\alpha^*(2)\psi_\beta(1)\psi_\alpha(2) \tag{9-7}$$

Como las dos partículas idénticas son indistinguibles, debe ser posible intercambiar sus marcas sin alterar una cantidad mensurable tal como la densidad de probabilidad. Como ejemplo, esta operación se realizará con (9-6), y se obtiene:

$$\psi_\alpha^*(1)\psi_\beta^*(2)\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \xrightarrow[2\to 1]{1\to 2} \psi_\alpha^*(2)\psi_\beta^*(1)\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)$$

donde las flechas indican que la expresión del primer miembro se transforma en la expresión del segundo miembro cuando 1 se cambia por 2 y 2 se cambia por 1. Sin embargo, es evidente que la función de densidad de probabilidad vuelta a marcar, no es igual a la función de densidad de probabilidad original. Por ejemplo, el primer término en la función vuelta a etiquetar (expresión del segundo miembro) es ψ_α^* evaluada en las coordenadas x_2, y_2, z_2, mientras que el primer término en la función original (expresión del primer miembro) es ψ_α^* evaluada en las coordenas x_1, y_1, z_1. Por lo tanto, el cambio de marcas de las partículas, en realidad sí cambia la función de densidad de probabilidad calculada de la eigenfunción de (9-4). Asimismo lo anterior es cierto para la eigenfunción de (9-5). Por lo tanto, debe concluírse que éstas no son eigenfunciones aceptables para la descripción correcta de un sistema de dos partículas idénticas. De este modo, se ha justificado la sospecha expresada después de escribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (9-1).

Sin embargo, es posible construir una eigenfunción que satisfaga la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y posea también la deseable propiedad de que su función de densidad de probabilidad se mantenga invariable ante un cambio de marcas de las partículas. De hecho, existen dos formas de realizar lo anterior. Considérense dos combinaciones lineales de las eigenfunciones (9-4) y (9-5),

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \tag{9-8}$$

y

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \tag{9-9}$$

Por razones que pronto serán evidentes, a la primera se le llama eigenfunción total *simétrica* y a la segunda, eigenfunción total *antisimétrica*. Ahora bien, para un sistema que contenga una partícula en el estado cuántico α y otra partícula en un estado cuántico β, su energía total no dependerá de qué partícula esté en qué estado, si las partículas son idénticas. Así, tanto $\psi_T = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$ como $\psi_T = \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)$ son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, (9-1), correspondiendo al *mismo* valor de la energía total E_T. Dado que esa ecuación es lineal en ψ_T, se obtiene inmediatamente que las combinaciones lineales de las dos formas de ψ_T, a saber ψ_S y ψ_A, también son soluciones y como corresponden al mismo valor de E_T, son soluciones degeneradas, es decir, ψ_S y ψ_A son *eigenfunciones diferentes* que corresponden precisamente al *mismo eigenvalor*. A este fenómeno se le conoce como *degeneración de intercambio*, ya que la diferencia entre las eigenfunciones degeneradas tiene que

ver con el intercambio de marcas de las partículas. El factor $1/\sqrt{2}$ asegura que ψ_S y ψ_A estarán normalizadas si $\psi_T = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$ y $\psi_T = \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)$ están normalizadas.

Resulta fácil calcular las funciones de densidad de probabilidad para ψ_S y ψ_A, y después demostrar que, en ambos casos, sus valores no se alteran por un intercambio en las marcas de las partículas. Este resultado se obtendrá investigando el efecto de un intercambio de marcas, en las eigenfunciones mismas. Realizando las operaciones, se obtiene:

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \xrightarrow[2\to1]{1\to2} \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) + \psi_\beta(2)\psi_\alpha(1)] = \psi_S \qquad (9\text{-}10)$$

y

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)] \xrightarrow[2\to1]{1\to2} \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(2)\psi_\beta(1) - \psi_\beta(2)\psi_\alpha(1)] = -\psi_A \qquad (9\text{-}11)$$

Se puede observar que la eigenfunción total simétrica ψ_S permanece invariable ante el intercambio de marcas de las partículas, y que la eigenfunción total antisimétrica ψ_A queda multiplicada por menos uno al intercambiar las marcas de las partículas. (Estas propiedades son las que dan lugar a sus nombres). Por lo tanto, para las densidades de probabilidad se tiene:

$$\psi_S^*\psi_S \xrightarrow[2\to1]{1\to2} \psi_S^*\psi_S \qquad (9\text{-}12)$$

y

$$\psi_A^*\psi_A \xrightarrow[2\to1]{1\to2} (-1)^2\psi_A^*\psi_A = \psi_A^*\psi_A \qquad (9\text{-}13)$$

Por lo tanto, para ambas eigenfunciones totales, simétrica y antisimétrica, las funciones de densidad de probabilidad permanecen invariables ante un intercambio de las marcas de las partículas. El hecho de que la eigenfunción antisimétrica cambie de signo ante un intercambio de las marcas de las partículas, no es objetable, desde luego, ya que una eigenfunción no es en sí una cantidad mensurable.

Puede demostrarse que *cualquier* cantidad mensurable que pueda obtenerse de la eigenfunción, total, simétrica o antisimétrica, no será afectada por un intercambio de las marcas de las partículas y, por lo tanto, estas dos eigenfunciones proporcionan una descripción adecuada de un sistema que contenga dos partículas idénticas. *A pesar de que las marcas 1 y 2 aparecen en las expresiones para ψ_S y ψ_A, ésto no viola el requisito de indistinguibilidad puesto que el valor de cualquier cantidad mensurable que se obtenga de dichas eigenfunciones, es independiente del modo como se asignen las marcas.*

Ejemplo 9-1. Dos partículas idénticas se mueven independientemente en una caja unidimensional de longitud a, con una de ellas en el estado base del potencial cuadrado infinito que describe la caja, mientras que la otra se encuentra en el primer estado excitado de dicho potencial. Por simplicidad, se supone que las partículas no tienen spin, de modo que las eigenfunciones totales del sistema solamente son eigenfunciones espaciales. (a) Calcular las eigenfunciones totales simétrica y antisimétrica de (9-8) y (9-9) y verificar que el factor $1/\sqrt{2}$ es estas ecuaciones realmente las normaliza apropiadamente.

Utilizando las formas generales (6-79) y (6-80) para las eigenfunciones de una partícula en un potencial de pozo cuadrado infinito y utilizando también la constante de normalización calculada en el ejemplo 5-10, se encuentra que la eigenfunción espacial normalizada correspondiente al estado base, está dada por $\sqrt{2/a}\cos(\pi x/a)$ y la correspondiente al primer estado excitado por $\sqrt{2/a}\,\text{sen}(2\pi x/a)$. Por lo tanto, si se

denotan las eigenfunciones espaciales simétrica y antisimétrica del sistema de dos partículas por ψ_+ y ψ_-, utilizando (9-8) y (9-9) se obtiene.

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{2}{a}\left[\cos\frac{\pi x_1}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_2}{a} + \text{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}\right]$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{2}{a}\left[\cos\frac{\pi x_1}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_2}{a} - \text{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}\right]$$

donde tanto x_1 como x_2 se encuentran en el intervalo de $-a/2$ a $a/2$. Si x_1 o x_2 se encuentran fuera de ese intervalo, ψ_+ y ψ_- se hacen cero, ya que las eigenfunciones de una sola partícula tienen valor cero en esos puntos. La integral de normalización de ψ_+ es:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_+^*\psi_+\,dx_1\,dx_2$$

$$= \int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2}\frac{1}{2}\left(\frac{2}{a}\right)^2\left[\cos^2\frac{\pi x_1}{a}\,\text{sen}^2\frac{2\pi x_2}{a} + \text{sen}^2\frac{2\pi x_1}{a}\cos^2\frac{\pi x_2}{a}\right.$$

$$+ \cos\frac{\pi x_1}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_2}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}$$

$$\left.+ \text{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}\cos\frac{\pi x_1}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_2}{a}\right]dx_1\,dx_2$$

$$= \frac{1}{2}\left[\int_{-a/2}^{a/2}\frac{2}{a}\cos^2\frac{\pi x_1}{a}\,dx_1\int_{-a/2}^{a/2}\frac{2}{a}\text{sen}^2\frac{2\pi x_2}{a}\,dx_2 + \int_{-a/2}^{a/2}\frac{2}{a}\text{sen}^2\frac{2\pi x_1}{a}\,dx_1\int_{-a/2}^{a/2}\cos^2\frac{\pi x_2}{a}\,dx_2\right.$$

$$+ \int_{-a/2}^{a/2}\frac{2}{a}\cos\frac{\pi x_1}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\,dx_1\int_{-a/2}^{a/2}\frac{2}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_2}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}\,dx_2$$

$$\left.+ \int_{-a/2}^{a/2}\frac{2}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\cos\frac{\pi x_1}{a}\,dx_1\int_{-a/2}^{a/2}\frac{2}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x_2}{a}\,dx_2\right]$$

Ahora bien, cada uno de los dos primeros términos en el paréntesis cuadrado es igual a uno, ya que ambas integrales son justamente las integrales de normalización de las eigenfunciones normalizadas de una partícula $\sqrt{2/a}\cos(\pi x/a)$ y $\sqrt{2/a}\,\text{sen}(2\pi x/a)$. Además, cada uno de los dos últimos términos en el paréntesis cuadrado es igual a cero, ya que ambos son el producto de dos integrales cuya forma y valor es

$$\int_{-a/2}^{a/2}\cos\frac{\pi x}{a}\,\text{sen}\frac{2\pi x}{a}\,dx = 0$$

Este resultado puede verificarse en cualquier tabla de integrales definidas. Por lo tanto, la integral de normalización para ψ_+ resulta (1/2) [1 + 1], donde 1/2 resulta de elevar al cuadrado el factor $1/\sqrt{2}$ en (9-8). Así pues, se encuentra que ese factor sí normaliza adecuadamente a ψ_+ haciendo que su integral de normalización sea igual a uno. Asimismo, se puede demostrar inmediatamente que para ψ_- se obtiene la misma conclusión.

Repasando cualquier tabla de integrales definidas, se demuestra además que para cualquier par de eigenfunciones senoidales diferentes para una partícula en un potencial de pozo cuadrado infinito, la integral de $-a/2$ a $a/2$ es igual a cero. De hecho, es posible demostrar de consideraciones generales que la

integral sobre toda x de *cualquiera* de dos eigenfunciones *diferentes* de cualquier potencial en particular, es igual a cero. A esta propiedad se le llama *ortogonalidad*. Debido a la ortogonalidad de las eigenfunciones de una partícula, solo 2 de los 2^2 términos en la integral de normalización para cualquiera eigenfunción de dos partículas, simétrica o antisimétrica, tienen valores diferentes de cero; y debido a que las eigenfunciones de una sola partícula están normalizadas, esos valores son ambos iguales a uno. Por lo tanto, el factor $1/\sqrt{2}$ en (9-8) y (9-9), asegura que estas eigenfunciones totales estén normalizadas en todos los casos.

(b) Escribir expresiones para los valores de expectación de la distancia de separación D entre partículas para el caso en el cual la eigenfunción espacial, del sistema de dos partículas, es simétrica y para el caso en el cual es antisimétrica. Enseguida, demostrar que en ninguno de estos casos, el intercambio de marcas en las partículas afecta ese valor de expectación.

La distancia de separación D, es el valor absoluto de la diferencia entre sus coordenadas x, es decir, $D = |x_2 - x_1| = |x_1 - x_2|$. *El valor esperado* $\overline{D}$, para el caso de ψ_+ será:

$$\overline{D} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_+^* D\psi_+ \, dx_1 \, dx_2 = \int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} D\psi_+^2 \, dx_1 \, dx_2$$

$$= \frac{2}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} |x_2 - x_1| \left[\cos^2\frac{\pi x_1}{a}\operatorname{sen}^2\frac{2\pi x_2}{a} + \operatorname{sen}^2\frac{2\pi x_1}{a}\cos^2\frac{\pi x_2}{a}\right.$$

$$\left. + 2\cos\frac{\pi x_1}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_2}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}\right] dx_1 \, dx_2$$

Similarmente, para el caso de ψ_-

$$\overline{D} = \frac{2}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\int_{-a/2}^{a/2} |x_2 - x_1| \left[\cos^2\frac{\pi x_1}{a}\operatorname{sen}^2\frac{2\pi x_2}{a} + \operatorname{sen}^2\frac{2\pi x_1}{a}\cos^2\frac{\pi x_2}{a}\right.$$

$$\left. - 2\cos\frac{\pi x_1}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_2}{a}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_1}{a}\cos\frac{\pi x_2}{a}\right] dx_1 \, dx_2$$

La evaluación de las integrales en estos dos casos, requiere de cierto trabajo, pero puede observarse inmediatamente que, en ambos casos, los valores no son afectados por un intercambio de las marcas de las partículas. La razón radica en que en ambas integrales no se alteran ni el factor $|x_2 - x_1|$ ni el tercer término del paréntesis rectangular, a pesar de que el primer término del paréntesis rectangular se transforma en el segundo y el segundo término en el primero.

Puede observarse también que el valor de $\overline{D}$ obtenido con la eigenfunción espacial simétrica, es diferente del valor que se obtiene con la eigenfunción espacial antisimétrica, por la diferencia en signo del tercer término del paréntesis rectangular. En otras palabras, la separación promedio de las partículas en un estado en que la eigenfunción espacial es simétrica, es diferente de la que resulta cuando están en un estado en que la eigenfunción espacial es antisimétrica. En la sección 9-4 se continuará la interpretación de estos resultados y se verá que tienen consecuencias muy interesantes. ◀

9.3 El principio de exclusión

Como resultado de un análisis de los datos relativos a los niveles de energía de los átomos, que pronto se verá, Pauli, en 1925 llegó a su famoso *principio de exclusión* (condición más débil):

En un átomo multielectrónico, nunca podrán existir más de un electrón en el mismo estado cuántico.

Analizando otros datos experimentales, estableció que el principio de incertidumbre representa una propiedad de los electrones y no específicamente de los átomos. El principio de exclusión opera en cualquier sistema que contenga electrones.

A continuación, considérese la eigenfunción antisimétrica total (9-9), para un caso en el que ambas partículas se encuentren en el mismo estado cuántico, espacial y de spin denotado por α a saber,

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2) - \psi_\alpha(1)\psi_\alpha(2)] \equiv 0 \tag{9-14}$$

La eigenfunción es idénticamente igual a cero. Por lo tanto, si dos partículas son descritas por la eigenfunción antisimétrica total, ambas no podrán estar en un estado con los mismos números cuánticos espacial y de spin. Las eigenfunciones que han sido tratadas anteriormente, se obtuvieron bajo la suposición de que se tienen dos partículas idénticas y que las interacciones entre ellas son despreciables. Si existen más de dos partículas idénticas y/o si sus interacciones deben tomarse en cuenta, las eigenfunciones totales toman formas diferentes como se verá en los ejemplos 9-2 y 9-3. Sin embargo, estas eigenfunciones aún pueden utilizarse para construir combinaciones lineales de simetría definida, ya sea simétricas o antisimétricas, y las combinaciones lineales antisimétricas aún tienen valores idénticamente igual a cero y *cualesquiera de dos* partículas que se encuentren en el mismo estado cuántico. En otras palabras, todas las eigenfunciones totales antisimétricas tienen propiedades tales que se sujetan a los requisitos del principio de exclusión. Así, se concluye que existe una expresión alternativa del *principio de exclusión.* (Condición más fuerte):

Un sistema que contenga varios electrones debe ser descrito por una eigenfunción total antisimétrica.

La condición especificada por este segundo enunciado del principio de exclusión es más fuerte que la especificada por el primer enunciado, ya que satisface aquella condición y además también satisface los requisitos de indistinguibilidad que demandan eigenfunciones totales de una simetría definida. En aquellos cálculos mecánico-cuánticos que pretendan una completa exactitud, deberá utilizarse la condición más fuerte, aunque la condición más débil, que es más fácil de aplicar, frecuentemente se utiliza en cálculos aproximados. El uso de estas condiciones en el tratamiento de átomos multielectrónicos será estudiado en la sección 9-5 y se harán comparaciones entre los resultados que se obtienen cuando se aplica la condición fuerte y los que se obtienen cuando se aplica la condición débil.

Al descubrir el principio de exclusión, Pauli encontró la respuesta a un problema que tenía mucho tiempo de existir en relación con átomos multielectrónicos. Escribió lo siguiente:

"La pregunta de por qué en un átomo en su estado base, los electrones no se encuentran todos ligados a la capa más profunda ya ha sido remarcada por Bohr como un problema fundamental en sus trabajos iniciales... Sin embargo, con base en la mecánica clásica, este fenómeno no podía ser explicado convincentemente. El que Bohr en ese tiempo y en estudios posteriores estuviese buscando una explicación más general me impresionó fuertemente".

La explicación del problema por Pauli fue efectivamente general. Los electrones no pueden estar todos ligados en el mismo estado cuántico en la capa más profunda del átomo, puesto que el sistema deberá ser descrito por eigenfunciones totales antisimétricas, que desaparecen si sólo dos electrones se encuentran en el mismo estado cuántico. Para hacer énfasis en qué tan fundamental es este problema, es preciso adelantarse un poco a este desarrollo para afirmar qué si todos los electrones en un átomo estuvieran en la capa más profunda, entonces, ese átomo sería esencialmente como un gas noble. El átomo sería inerte y no se combinaría con otros átomos para formar moléculas. Si los electrones no estuvieran sujetos al principio de exclusión, ésto sería válido para todos los átomos y consecuentemente el universo sería radicalmente diferente. Por ejemplo, sin moléculas, ¡no habría vida!

Ejemplo 9-2 Determine la forma de la eigenfunción total antisimétrica normalizada para un sistema de tres partículas, suponiendo que la interacción entre las partículas puede ser ignorada.

Esto puede realizarse fácilmente, notando que la eigenfunción total antisimétrica para un sistema de dos partículas

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)]$$

también puede escribirse como el llamado *determinante de Slater*

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) \end{vmatrix}$$

donde $2! = 2 \times 1 = 2$. La identidad entre estas dos expresiones puede comprobarse desarrollando el determinante. Ahora bien, en forma de determinante, la extensión al caso de tres partículas es obviamente

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) & \psi_\alpha(3) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) & \psi_\beta(3) \\ \psi_\gamma(1) & \psi_\gamma(2) & \psi_\gamma(3) \end{vmatrix}$$

donde $3! = 3 \times 2 \times 1 = 6$. Desarrollando este determinante se obtiene

$$\begin{aligned} \psi_A = \frac{1}{\sqrt{3!}} [&\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\psi_\alpha(3) \\ &+ \psi_\gamma(1)\psi_\alpha(2)\psi_\beta(3) - \psi_\gamma(1)\psi_\beta(2)\psi_\alpha(3) \\ &- \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\psi_\gamma(3) - \psi_\alpha(1)\psi_\gamma(2)\psi_\beta(3)] \end{aligned}$$

Cada término en esta combinación lineal es solución de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para la misma energía total, para una función de energía potencial en la que las variables pueden ser agrupadas en una suma de términos cada uno de los cuales depende de las coordenadas de una sola partícula, como en (9-2). Por lo tanto, la combinación lineal también es una solución. Intercambiando apropiadamente las marcas de las partículas, como se hizo en (9-11) para el sistema de dos partículas, puede verificarse fácilmente que es antisimétrica respecto al intercambio de cualquier par de marcas. También tiene la propiedad de ser idénticamente igual a cero, si cualesquiera dos de las partículas se encuentran en el mismo estado cuántico espacial y de spin. Esto puede verse más fácilmente en el determinante mismo, ya que una propiedad bien conocida de los determinantes, es que se anulan si cualesquiera dos de sus renglones son idénticos. No es difícil seguir el procedimiento señalado en el ejemplo 9-1 y demostrar que ψ_A estará normalizada si $\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)$, y términos similares, están normalizados. ◀

En cuanto a otra clase de partículas, como para el caso de electrones, el tipo de simetría que presentan es una cuestión que se determina por el experimento. Se encuentra que sistemas de protones, neutrones o de algunas otras partículas, deben ser descritos por eigenfunciones totales antisimétricas. Por otro lado, se encuentra que los sistemas de fotones, átomos de helio, y otras partículas deben describirse por eigenfunciones totales simétricas. Existen fenómenos muy importantes asociados con el tipo de simetría que presentan las partículas simétricas y el caso más espectacular es el comportamiento de "super fluído" que presenta el helio líquido a temperaturas cercanas al cero absoluto. Este, y otros ejemplos serán estudiados en el capítulo II, que trata de las propiedades generales de sistemas que contienen un número grande de partículas, simétricas o antisimétricas.

En la tabla 9-1 se presenta una lista de varias clases de partículas, su tipo de simetría, así como el valor del número cuántico s que especifica la magnitud de su impulso angular de spin. Asimismo, se indican los nombres *fermión* y *bosón* que algunas veces se utilizan para distinguir las dos clases de partículas de acuerdo con su tipo de simetría. Es muy interesante hacer notar que debe existir una relación entre el tipo de simetría de la partícula y su spin. El punto es que todas las partículas antisimétricas poseen spin semientero, tal como ocurre con el electrón, mientras que las partículas simétricas poseen spin cero o entero. Esta relación ha sido estudiada por Pauli y otros, utilizando formas muy sofisticadas de la mecánica cuántica, y algo se conoce ya respecto a su origen pero al nivel de este libro, lo apropiado es decir que el tipo de simetría de una partícula debe considerarse como una propiedad básica, como la masa, la carga y el spin que

TABLA 9-1 Tipo de simetría de diversas partículas

Partícula	Simetría	Nombre genérico	Spin (s)
Electrón	Antisimétrica	Fermión	1/2
Positrón	Antisimétrica	Fermión	1/2
Protón	Antisimétrica	Fermión	1/2
Neutrón	Antisimétrica	Fermión	1/2
Muón	Antisimétrica	Fermión	1/2
Partícula α	Simétrica	Bosón	0
Atomo de He (estado base)	Simétrica	Bosón	0
Mesón π	Simétrica	Bosón	0
Fotón	Simétrica	Bosón	1
Deuterón	Simétrica	Bosón	1

se determina experimentalmente. Una excepción a esta afirmación es que la simetría de una partícula compuesta y ligada, como un átomo de helio, puede predecirse inmediatamente a partir de las simetrías de sus partículas constituyentes. (Si la partícula compuesta contiene un número par de partículas antisimétricas, será simétrica).

Ejemplo 9-3 Determinar la forma de la eigenfunción total simétrica normalizada para un sistema de tres partículas en el que las interacciones entre las partículas se desprecian.

Análogamente a las relaciones entre (9-8) y (9-9), la eigenfunción requerida puede obtenerse inmediatamente escribiendo la combinación lineal que se encontró en el ejemplo 9-2 pero con todos los signos positivos. Es decir,

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{3!}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\psi_\alpha(3) + \psi_\gamma(1)\psi_\alpha(2)\psi_\beta(3) + \psi_\gamma(1)\psi_\beta(2)\psi_\alpha(3) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\alpha(1)\psi_\gamma(2)\psi_\beta(3)]$$

Inmediatamente es evidente que esta combinación lineal es simétrica respecto al intercambio de cualesquiera de dos marcas de las partículas. La normalización puede verificarse utilizando el procedimiento del ejemplo 9-1. ◀

9.4 El átomo de helio y las fuerzas de intercambio.

Enseguida se considera una propiedad de las partículas indistinguibles que, cuando menos, es muy extraña. Considérese un par de electrones en un sistema tal que se puede ignorar cualquier interacción explícita entre las dos partículas (como la interacción de Coulomb). De acuerdo con (9-9), la eigenfunción total del sistema puede escribirse

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) - \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)]$$

Esta eigenfunción total antisimétrica depende tanto de las variables espaciales como de las variables de spin de los dos electrones ya que los símbolos α, β, γ, . . . especifican conjuntos de tres números cuánticos más un número cuántico de spin. Para el contexto de este estudio, se

volverá a escribir de modo tal que las variables de spin y las variables espaciales aparezcan en factores separados, es decir,

(eigenfunción total) = (eigenfunción espacial) x (eigenfunción de spin).

Así también, los dos factores tendrán una simetría particular respecto al intercambio de marcas. Entonces, la antisimetría de la eigenfunción total se podrá obtener, multiplicando una eigenfunción espacial simétrica por una eigenfunción de spin antisimétrica, o multiplicando una eigenfunción espacial antisimétrica por una eigenfunción de spin simétrica.

Las eigenfunciones espaciales normalizadas, simétricas y antisimétricas tienen las formas utilizadas en el ejemplo 9-1

$$\text{eigenfunción espacial simétrica} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(1)\psi_a(2)] \tag{9-15}$$

$$\text{eigenfunción espacial antisimétrica} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_b(1)\psi_a(2)] \tag{9-16}$$

donde $\psi_a(1)\psi_b(2)$ y $\psi_b(1)\psi_a(2)$ están normalizadas. Cada símbolo de la serie a, b, c,.... etc., representa un conjunto particular de tres números cuánticos espaciales únicamente. (A diferencia de las $\alpha, \beta, \gamma, \ldots$, que representan conjuntos de tres números cuánticos principales y uno de spin). Desde luego que estas formas son muy *generales* puesto que existe una gran variedad de ψ_a y ψ_b diferentes para sistemas diferentes.

La forma que toman las eigenfunciones de spin simétricas y antisimétricas es un asunto completamente diferente, puesto que la variable de spin no es continua, como en el caso de las variables espaciales, sino discreta. Por ejemplo, para un electrón, el spin sólo puede tener dos orientaciones respecto a un eje z cualquiera, ya que su componente z solo puede ser $+1/2$ o $-1/2$, en unidades de $\hbar$. Por lo tanto, funciones continuas, como las eigenfunciones espaciales del átomo con un electrón presentadas en la tabla 7-2, no pueden ser utilizadas como eigenfunciones de spin. Para el caso de dos electrones sin interacción, cada uno de los cuales tiene dos posibles orientaciones de spin; existen solo cuatro estados de spin posibles en el sistema y, por lo tanto, solo cuatro eigenfunciones de spin posibles. Dado que son tan pocas, pueden presentarse sus formas *específicas*. Si estas cuatro eigenfunciones se escriben de modo tal que tengan una simetría definida, entonces, una de ellas será antisimétrica y las otras tres simétricas. Para escribir las eigenfunciones de spin en forma matemática, frecuentemente se usan matrices; pero en esta ocasión se escribirán como combinaciones de los símbolos $+1/2$, y $-1/2$ ya que de esa forma su interpretación será mas obvia.

La única posible eigenfunción antisimétrica de spin para los electrones sin interacción, es:

$$\text{eigenfunción de spin antisimétrica} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[(+1/2,-1/2) - (-1/2,+1/2)] \quad \text{(singulete)} \tag{9-17}$$

Esta es una combinación lineal del símbolo $(+1/2, -1/2)$ que especifica un estado en el que las componentes z de los spin tienen valores de $1/2$ para el electrón 1 y $-1/2$ para el electrón 2, en unidades de $\hbar$, y menos el símbolo $(-1/2, +1/2)$ que especifica un estado en el que los componentes z son $-1/2$ para el electrón 1 y $+1/2$ para el electrón 2. Debido a este signo menos, la combinación lineal es antisimétrica ante un intercambio de marcas de los electrones ya que un intercambio de esa naturaleza transformará el primer símbolo en $(-1/2, +1/2)$ y el segundo símbolo en $(+1/2, -1/2)$, combinando así el signo total de la combinación lineal. No será necesario seguir manejando estos símbolos y sus combinaciones lineales y solo se utilizarán para describir estados de spin, de modo que no será necesario seguir especificando sus propiedades matemáticas (es decir, matriciales).

Existen tres posibles eigenfunciones simétricas de spin:

$$\text{eigenfunciones simétrica de spin} \quad \begin{matrix} (+1/2,+1/2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[(+1/2,-1/2)+(-1/2,+1/2)] \quad \text{(triplete)} \\ (-1/2,-1/2) \end{matrix} \tag{9-18}$$

Su simetría es obvia puesto que en cada una de ellas, un intercambio de marcas no produce ningún cambio en la eigenfunción. Estas tres eigenfunciones describen los llamados estados de *triplete*, mientras que las eigenfunciones antisimétricas describen los llamados estados de *singulete*. Las cuatro anteriores eigenfunciones de spin están normalizadas.

Se puede obtener una interpretación física de los estados de singulete y triplete calculando, para cada estado, la magnitud de S' y de la componente z S'_z del *impulso angular de spin total* $\mathbf{S}'$. Este vector es

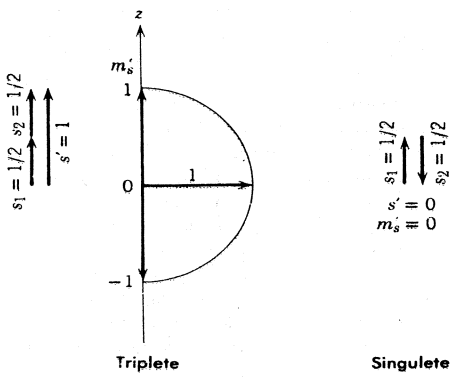
$$\mathbf{S}' = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \tag{9-19}$$

la suma de los impulsos angulares de spin de los dos electrones. S' y S'_z como todo impulso angular en mecánica cuántica, están cuantizados de acuerdo con las relaciones

$$\begin{aligned} S' &= \sqrt{s'(s'+1)}\hbar \\ S'_z &= m'_s\hbar \end{aligned} \tag{9-20}$$

FIGURA 9-2

Diagramas vectoriales que representan las reglas para sumar los números cuánticos $s_1 = 1/2$ y $s_2 = 1/2$ para obtener los valores posibles de los números cuánticos s' y m'_s. *Izquierda:* El valor máximo posible de s' se obtiene cuando un vector de magnitud s_1 se suma a un vector paralelo de magnitud s_2, de modo que $s' = s_1 + s_2 = 1/2 + 1/2 = 1$. Del valor máximo posible de la componente z de este vector se obtiene el valor máximo posible del número cuántico m'_s, y del valor mínimo posible de la componente z, se obtiene el valor mínimo posible de m'_s. Los valores intermedios de m'_s (solo uno en este caso) difieren entre sí por números enteros. Por lo tanto, los valores posibles son $m'_s = +1, 0, -1$. *Derecha:* Suma de un vector de magnitud $s_1 = 1/2$ a un vector antiparalelo de magnitud $s_2 = 1/2$ para dar un vector de magnitud $s' = s_1 - s_2 = 1/2 - 1/2 = 0$. La componente z de un vector de magnitud cero, debe ser también cero, de modo que el único valor posible de m'_s es cero. El término triplete se refiere al estado $s' = 1$ de donde resultan tres posibles valores de m'_s el término singulete se refiere al estado $s' = 0$, de donde resulta un solo valor de m'_s.



Los números cuánticos satisfacen relaciones

$$\begin{aligned} m'_s &= -s', \ldots, +s' \\ s' &= 0, 1 \end{aligned} \tag{9-21}$$

Las relaciones entre los números cuánticos, obtenidas al calcular S' y S'_z pueden explicarse y representarse por las reglas de la adición vectorial utilizadas en la sección 8-5. En la figura 9-2 se muestran dos vectores de longitud $s = 1/2$ que se suman de modo tal que se forma un vector de longitud $s' = 0$ o 1, que puede tener, en el último caso, componentes $z + 1, 0, -1$. Como ya antes se advirtió al estudiante, estos diagramas vectoriales deben interpretarse con cuidado, ya que los vectores en realidad no son impulsos angulares. Sin embargo, sí se transmite correctamente la idea de que en los tres *estados de triplete*, que corresponden a $s' = 1$, $m'_s = +1$; $s' = 1$, $m'_s = 0$; $s' = 1$, $m'_s = -1$, los spin electrónicos se encuentran *esencialmente paralelos*. En el *estado de singulete* $s' = 0$, $m'_s = 0$, los spin electrónicos están *esencialmente antiparalelos*. En la figura 9-3 se intenta mostrar los impulsos angulares; sin

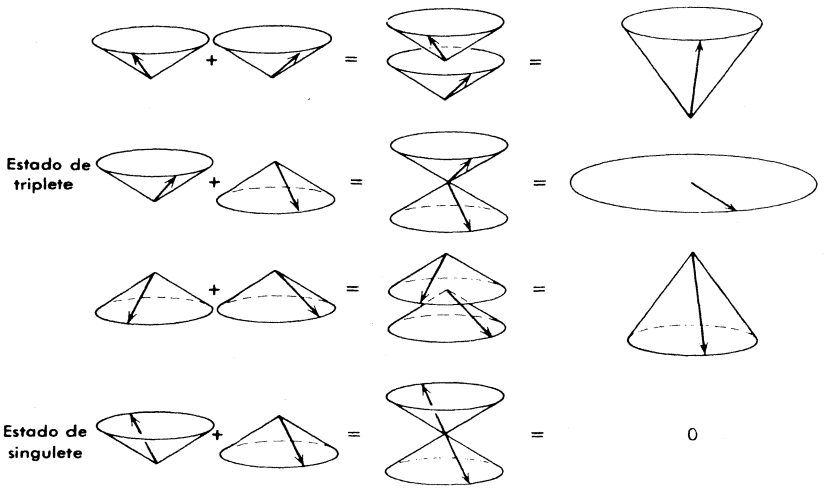


FIGURA 9-3

Estado de triplete: Dos vectores de impulso angular de spin, de magnitudes $S_1 = S_2 = \sqrt{(1/2)(1/2 + 1)}\,\hbar$ precede aleatoriamente pero acompasado, de modo que permanece apuntando en la misma dirección general, en torno al eje z vertical. Si sus componentes z son ambas positivas, $S_{1_z} = S_{2_z} = +(1/2)\,\hbar$, o si son negativas $S_{1_z} = S_{2_z} = -(1/2)\,\hbar$, su suma es un vector de spin total de magnitud $S' = \sqrt{1(1 + 1)}\,\hbar$ y una componente z positiva $S'_z = +1\hbar$, o componente z negativa $S'_z = -1\hbar$. Si los vectores de spin tienen componentes z de signos opuestos, pero proceden de modo tal que siempre apuntan en la misma dirección general, el vector de spin total tiene una componente z igual a cero, $S'_z = 0$, pero mantiene la magnitud $S' = \sqrt{1(1+1)}\,\hbar$, porque precede en el plano perpendicular al eje z. Estas son las tres posibilidades que pueden ocurrir en el estado de triplete. *Estado de singulete:* si los dos vectores de spin tienen componentes z de signos opuestos y preceden de modo tal que permanecen apuntando esencialmente en direcciones opuestas el vector de spin total tendrá una componente z, igual a cero, $S'_z = 0$, ya que tiene magnitud cero. Este es el estado de singulete. De hecho, los dos vectores de spin se encuentran fuera de fase en este estado. Del mismo modo, en el estado de triplete $S'_z = 0$ los dos vectores están en fase. Estas fases se relacionan con los signos más y menos que aparecen entre los términos de las combinaciones lineales de las eigenfunciones de spin totales (9-17) y (9-18).

embargo, como realmente no se pueden representar las combinaciones lineales (9-17) y (9-18), se encuentra un tanto simplificada.

A continuación, se emplearán las ideas anteriores para explicar una propiedad fundamental de un sistema que contenga dos electrones. Si los spin de los electrones son "paralelos", y la eigenfunción de spin es una del triplete simètrico (9-18), la eigenfunción espacial deberá ser antisimétrica, como en (9-16), con el fín de poder tener una *eigenfunción antisimétrica total.* **Considérese esta situación para el caso en que las variables espaciales de los dos electrones** tengan casi los mismos valores. Entonces $\psi_a(1) \simeq \psi_a(2)$ ya que el primer miembro se calcula en las coordenadas del electrón 1, que son casi iguales a las coordenadas del electrón 2, que es donde se calcula el segundo miembro. Por el mismo razonamiento $\psi_b(1) \simeq \psi_b(2)$ y consecuentemente

$$\psi_a(1)\psi_b(2) \simeq \psi_b(1)\psi_a(2)$$

En este caso, el valor de la eigenfunción espacial antisimétrica es

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_b(1)\psi_a(2)] \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_b(1)\psi_a(2) - \psi_b(1)\psi_a(2)] = 0$$

El resultado es que la densidad de probabilidad será muy pequeña cuando los electrones en el estado de triplete tengan coordenas similares es decir, cuando estén muy próximos entre sí. Como la probabilidad de encontrarlos muy próximos entre sí, es pequeña, *los electrones en el estado de triplete actúan como si se repelieran entre sí.* **Esto no tiene nada que ver con la repulsión de Coulomb, ya que se ha supuesto desde el inicio de este análisis, que no existe interacción explícita entre los electrones; en cambio, sí tiene que ver con las propiedades de eigenfunciones espaciales antisimétricas.**

Las eigenfunciones espaciales simétricas poseen propiedades inversas. Si la eigenfunción espacial de dos electrones es simétrica, y ocurre que tienen coordenadas casi iguales, entonces esa eigenfunción será:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_b(1)\psi_a(2)] \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_b(1)\psi_a(2) + \psi_b(1)\psi_a(2)] = \sqrt{2}\,\psi_b(1)\psi_a(2)$$

ya que una vez más se tendrá $\psi_a(1) \simeq \psi_a(2)$ y $\psi_b(1) \simeq \psi_b(2)$. Por lo tanto, la densidad de probabilidad tendrá el valor $2\psi_b^*(1)\psi_a^*(2)\psi_b(1)\psi_a(2)$ cuando los electrones con una eigenfunción espacial simétrica estén muy próximos. Este valor es el doble del valor promedio sobre todo el espacio, de la densidad de probabilidad para la eigenfunción simétrica (ya que $\psi_b(1)\psi_a(2)$ están normalizadas, de modo que la integral de $\psi_b^*(1)\psi_a^*(2)\psi_b(1)\psi_a(2)$ sobre todo el espacio igual a uno, del mismo modo como la integral sobre todo el espacio de la densidad de probabilidad de la eigenfunción espacial simétrica). Por lo tanto, existe una alta probabilidad de encontrar a los dos electrones sin interacción muy próximos entre sí, si en particular su eigenfunción espacial es simétrica. Por lo tanto, si los spin de los electrones son "antiparalelos" y su eigenfunción de spin es el singulete antisimétrico, como en (9-17), la eigenfunción espacial deberá ser simétrica, como en (9-15), y *los electrones en el estado de singulete actúan como si se atrajeran entre sí,* ya que existe una probabilidad alta de encontrarlos muy cerca uno del otro.

En la figura 9-4 se ilustran las simetrías de superficies representando las dependencias en x_1 y x_2 de una eigenfunción espacial típica, simétrica o antisimétrica para un sistema unidimensional que contiene dos partículas idénticas sin interacción. El caso particular que se muestra corresponde a una partícula en el estado base de un potencial de pozo cuadrado infinito de anchura a, para la cual, la eigenfunción tiene la forma de media onda cosenoidal. La segunda partícula se encuentra en el primer estado excitado de ese mismo potencial, para la cual la eigenfunción tiene la forma de una onda senoidal completa. La superficie superior representa una situación en la que la partícula con ordenada x_1 se encuentra en el estado base (nótese la mitad del coseno en la dirección x_1) y la partícula cuya ordenada es x_2 se encuentra en el primer estado excitado (nótese el seno completo en la dirección x_2). Como las partículas son indistinguibles, resulta igualmente posible que el sistema se encuentre en una situación en la que la partícula con coordenada x_1 esté en el estado base. Esta situación es la que describe la segunda superficie desde arriba.

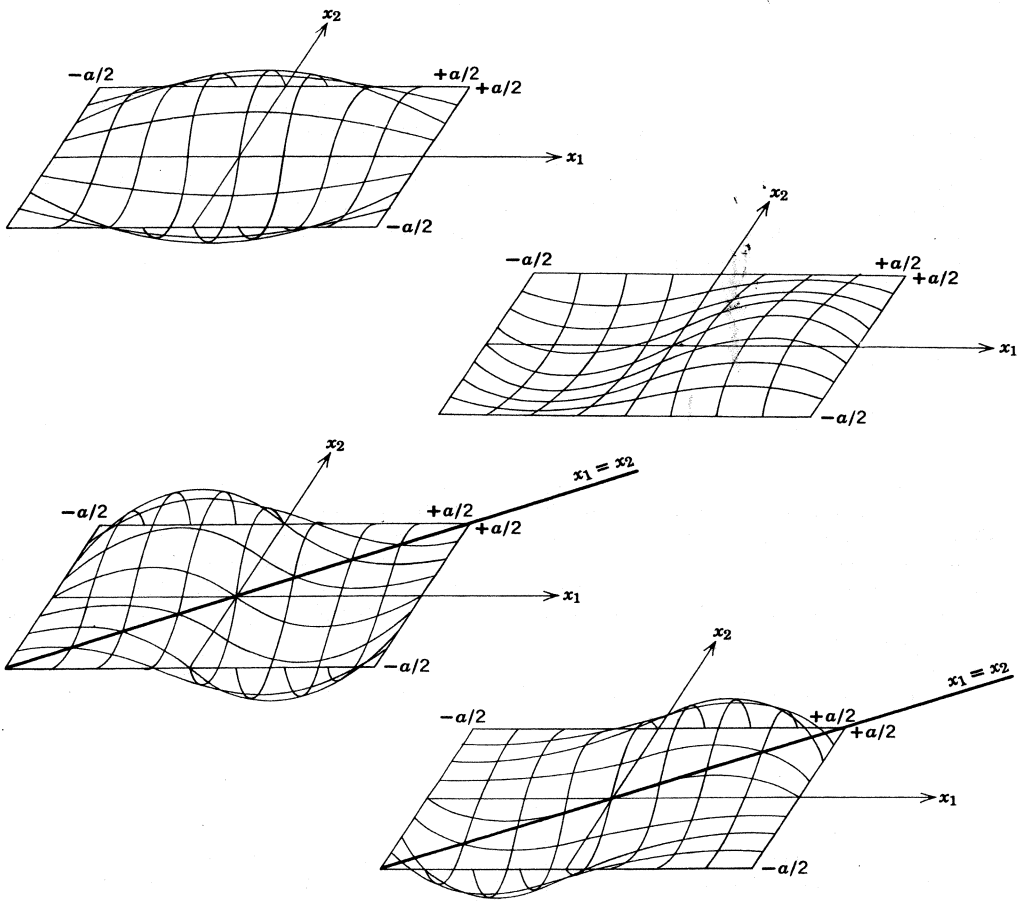
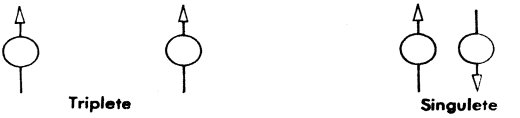


FIGURA 9-4

Se ilustran las eigenfunciones espaciales antisimétricas ψ_-, del ejemplo 9-1 para un sistema de dos partículas idénticas sin interacción en un potencial de pozo cuadrado infinito de anchura a cuando una partícula se encuentra en el estado base con eigenfunción $\sqrt{2/a}\ \cos\ (\pi x/a)$ y la otra se encuentra en el primer estado excitado con eigenfunción $\sqrt{2/a}$ sen $(2\pi x/a)$. *Arriba:* Se muestra el primer término de ψ_- construyendo la superficie cuya distancia por arriba o por abajo del plano x_1, x_2 corresponde al valor positivo o negativo de $(2/a)$ cos $(\pi x_1/a)$ sen $(2\pi x_2/a)$. *Medio superior:* Superficie que describe el segundo término de ψ_-, es decir, $(2/a)$ sen $(2\pi x_1/a)$ cos $(\pi x_2/a)$. *Medio inferior:* El primer término por $1/\sqrt{2}$ menos el segundo término, mostrando en sí la geometría de ψ_-. Evidentemente el valor de ψ_- es cero a lo largo de la línea $x_1 = x_2$, y es pequeña en la vencindad de la línea. Por lo tanto, la densidad de probabilidad $\psi_-^*\psi_-$ es muy pequeña siempre que $x_1 \simeq x_2$, y por lo tanto la probabilidad de que esta condición se satisfaga es muy pequeña. *Abajo:* La suma de los términos $(2/a)$ cos $(\pi x_1/a)$ sen $(2\pi x_2/a)$ y $(2/a)$ sen $(2\pi x_1/a)$ cos $(\pi x_2/a)$, por $1/\sqrt{2}$ mostrando la eigenfunción espacial simétrica para el sistema, ψ_+. Esta eigenfunción tiene sus magnitudes máximas a lo largo de la línea $x_1 = x_2$. Por lo tanto, la densidad de probabilidad $\psi_+^*\psi_+$ tendrá las magnitudes de mayores si las dos partículas se encuentran en la misma posición en su pozo unidimensional y de este modo se concluye que existe una gran posibilidad de encontrarlas muy cercanas entre sí.

FIGURA 9-5

Ilustración esquemática de la tendencia de los electrones en un estado de spin triplete a estar relativamente separados y la tendencia para electrones en un estado de spin singulete a estar relativamente cercanos.



Ambas situaciones son permitidas en la mecánica cuántica, tomando como *eigenfunción* del sistema una combinación lineal, por partes iguales, de las eigenfunciones que describen cualquiera de los casos. Esto puede hacerse tanto sumando como restando. Al restar se obtiene la eigenfunción espacial antisimétrica del sistema, que se ilustra en la tercera superficie; al sumar, se obtiene la eigenfunción espacial simétrica del sistema, que se ilustra por la superficie en la parte inferior de la figura. Aquí, el punto de interés primordial es que la eigenfunción espacial antisimétrica es cero a lo largo de la línea $x_1 = x_2$ que corresponde al caso en que las dos partículas estén en la misma posición, mientras que la eigenfunción espacial simétrica alcanza su magnitud máxima a lo largo de esa línea. Por lo tanto, la densidad de probabilidad $\psi^*\psi$ será muy pequeña para el caso antisimétrico y muy grande para el caso simétrico, cuando se calcule para coordenadas de las partículas que sean casi iguales.

En la mecánica clásica, podría resultar una situación aproximadamente anlóloga, en un sistema que contenga dos partículas idénticas, si no se hace algún intento de diferenciarlas por alguna medición, en el sentido de que la *función de probabilidad* que describa al sistema será una combinación lineal, por partes iguales (una para la partícula 1 que se encuentre en un estado de energía mas bajo y la partícula 2 en un estado de energía más alto, y la otra para cuando la partícula 1 está en un estado de energía más alto y la partícula 2 en un estado de energía más bajo). Pero este único resultado posible para esta situación, no tiene analogía con los dos posibles resultados cuánticos, ya que en mecánica cuántica se trabaja con eigenfunciones que pueden presentar interferencias ya que pueden ser de un signo o de otro (o aún complejas) y después se calculan sus probabilidades, mientras que en mecánica clásica se trabaja directamente con probabilidades que necesariamente deberán ser positivas y por tanto no pueden interferirse.

Si el estudiante puede visualizar figuras similares, podrá ver que existen las mismas marcadas diferencias entre las eigenfunciones espaciales simétricas y antisimétricas, cuando las partículas se encuentren en cualquiera de dos estados diferentes de un potencial de pozo cuadrado infinito, o de cualquier otro potencial de una, dos o tres dimensiones. Estas mismas conclusiones pueden obtenerse en sistemas que contengan mas de dos partículas idénticas con eigenfunciones espaciales que pueden ser simétricas o antisimétricas respecto a un intercambio de marcas de cualquier par de partículas, ya que la geometría de los términos en la eigenfunción que implican las dos marcas, puede ser analizada del mismo modo que para un sistema que contenga solo dos partículas.

Los casos de triplete y singulete para un sistema de dos electrones se ilustra esquemáticamente en la fig. 9-5. El requisito de que una descripción adecuada del sistema debe utilizar una eigenfunción *total* que sea *antisimétrica*, ante un intercambio de sus marcas, conduce a un acoplamiento entre sus variables espaciales y de spin. Actúan como si estuvieran bajo la influencia de una fuerza cuyo signo dependiera de la orientación relativa de sus spin. A esta se le llama *fuerza de intercambio*. Se trata puramente de un efecto mecánico-cuántico y no tiene análogo clásico.

Las fuerzas de intercambio no se producen entre electrones constreñidos siempre a permanecer separados. Un ejemplo de lo anterior son los electrones de dos átomos de hidrógeno que estén bien separados entre sí. De hecho, no será necesario tomar en cuenta ninguno de los requisitos de indistinguibilidad, para un par de partículas idénticas que estén tan separadas que sus funciones de onda no se traslapan. La razón es que simplemente estas partículas pueden distinguirse entre sí por medio de mediciones apropiadas.

Las fuerzas de intercambio se originan entre dos electrones en el mismo átomo o entre dos neutrones o dos protones en el mismo núcleo Lo anterior se demostrará, considerando los niveles de energía más bajos del átomo de helio.

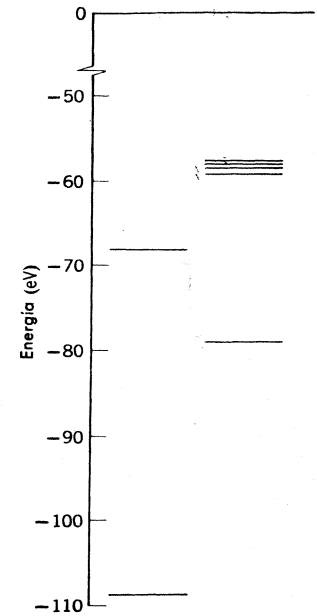


FIGURA 9-6

Izquierda: Niveles de energía del helio predichos por un tratamiento en el cual se ignora la interacción electrón - electrón. *Derecha:* Estado base y primeros cuatro estados excitados del helio, determinados a partir del espectro observado.

Ejemplo 9-4. El tratamiento más simple, pero menos preciso, del átomo de helio, implica ignorar la interacción de Coulomb entre sus dos electrones y tomar la energía total del átomo, como la suma de la energía de cada electrón, considerado como en un átomo de un solo electrón, en torno al núcleo de $Z = 2$. Utilizar este tratamiento para predecir las energías del estado base y del primer estado excitado del átomo.

De (7-22), para los eigenvalores del átomo con un solo electrón, se tiene

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n_1^2} - \frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n_2^2}$$
$$= -\frac{4 \times 13.6\,\text{eV}}{n_1^2} - \frac{4 \times 13.6\,\text{eV}}{n_2^2}$$

donde se toma $Z = 2$. En el estado base, los números cuánticos n_1 y n_2 son iguales a 1, y se obtiene.

$$E = -(4 + 4) \times 13.6\,\text{eV} = -109\,\text{eV}$$

En el primer estado excitado, uno de estos números cuánticos es igual a 1 y el otro igual a 2, obteniéndose

$$E = -(4 + 1) \times 13.6\,\text{eV} = -68\,\text{eV}$$

Las energías predichas se muestran en el primer miembro del diagrama de energías de la figura 9-6. En el segundo miembro de la figura se muestran las energías de los primeros niveles del helio, obtenidas de medidas del espectro óptico emitido por dicho átomo. Las predicciones son bastante incorrectas debido a que la interacción de Coulomb entre los dos electrones del átomo no es realmente despreciable en comparación con las interacciones de Coulomb entre cada electrón y el núcleo, como se supuso en este tratamiento simple y también porque el tratamiento ignora las fuerzas de intercambio. ◀

En la figura 9-7 se indica el origen de los primeros niveles de energía del átomo de helio. El primer miembro de la figura muestra la energía de los niveles que se encontrarían si no existiera interacción de Coulomb entre los electrones, como en el ejemplo 9-4. Si este fuera el caso, la energía total sólo sería la suma de las energías del átomo con un solo electrón para cada electrón

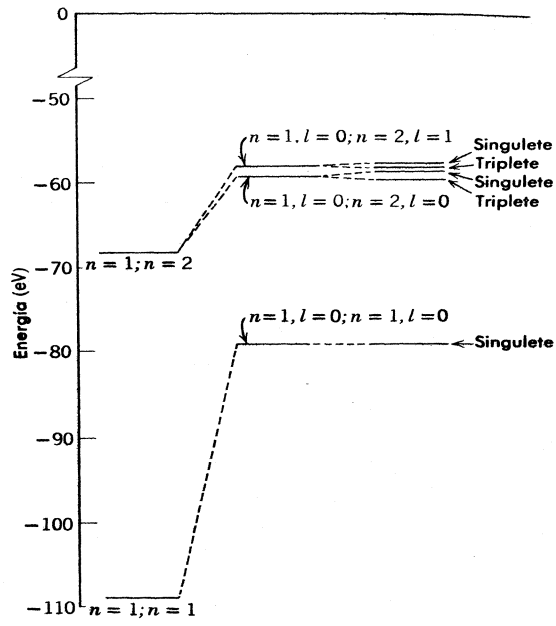


FIGURA 9-7

Niveles de energía profundos del helio. *Izquierda:* Niveles que se encontrarían si no existieran interacciones de Coulomb entre los electrones. *Centro:* Niveles que se encontrarían si existiera una interacción de Coulomb pero no fuerza de intercambio. La concordancia es excelente entre estos niveles y los que se muestran a la derecha de la figura 9-6.

moviéndose en torno al núcleo con $Z = 2$, en estados que serían descritos por las eigenfunciones del átomo con un solo electrón con los números cuánticos indicados. En el centro de la figura se muestra, en parte, el efecto de la interacción de Coulomb entre los electrones. Dado que los electrones tienen carga del mismo signo, esta energía de interacción es positiva, por lo cual los niveles de energía están más elevados. Además, el nivel superior está dividido en dos, puesto que los electrones se encuentran algo más separados, en promedio, cuando uno de éllos tiene $n = 1, l = 0$, y el otro $n = 2, l = 0$, que cuado uno tiene $n = 1$, $l = 0$ y el otro tiene $n = 2$, $l = 1$. Lo anterior puede aclararse si se examinan las densidades de probabilidad radial para el átomo con un solo electrón que aparecen en la figura 7-5. Como la energía asociada con la interacción de Coulomb entre los electrones es inversamente proporcional a su separación, la energía del átomo se eleva menos para el primer conjunto de números cuánticos y la eigenfunción con respecto al número cuántico l (encontrada en átomos con un electrón) queda eliminada por esta interacción. En el segundo miembro de la figura 9-7, se muestra el efecto de la fuerza de intercambio. En el estado de triplete, los electrones tienden a mantenerse separados, mientras que en el estado de singulete tienden a mantenerse unidos. Por lo tanto, la interacción de Coulomb entre éllos es relativamente menos efectiva en aumentar la energía del átomo en estados de triplete, y relativamente más efectiva en el estado de singulete. Asimismo, parte de la degeneración m_s (de átomos con un electrón) también se elimina por la interacción de Coulomb entre los electrones, y los niveles se dividen aún más en niveles de triplete y singulete. Estos son los niveles que se observan de las medidas del espectro del átomo de helio. De la mecánica cuántica, pueden obtenerse resultados cuantitativos que sean concordantes con las medidas experimentales, siempre y cuando se sumen a las energías encontradas en el ejemplo 9-4, los valores esperados de las energías debidas a la repulsión de Coulomb entre dos electrones. Estos valores de expectación se calculan utilizando eigenfunciones totales antisimétricas, compuestas de eigenfunciones de átomo con un electrón para $Z = 2$.

Es particularmente interesante hacer notar que en la figura 9-7 no aparece un nivel de triplete correspondiente al nivel de singulete del estado base del helio. No aparece porque la

eigenfunción espacial antisimétrica que debe utilizarse multiplicando a la eigenfunción simétrica de spin del triplete, tiene la forma

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_a(2) - \psi_a(1)\psi_a(2)] \equiv 0$$

En el estado base, su valor es idénticamente igual a cero ya que los números cuánticos espaciales para ambos electrones tienen los mismos valores $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$. Ahora bien, de acuerdo con el principio de exclusión, solo puede tenerse un estado de singulete en el estado base, ya que los números cuánticos de spin deberán ser diferentes en los dos electrones, es decir, los dos electrones deberán tener spin "antiparalelos". Históricamente, este argumento fué propuesto en el orden opuesto. El hecho experimental de qué en el espectro del helio no aparezca este estado de triplete, fué una de las principales evidencias que condujeron a Pauli a descubrir el principio de exclusión.

9.5 Teoría de Hartree

En este punto se inicia el estudio mecánico cuántico de átomos multielectrónicos que ocupará el resto de este capítulo, y el capítulo siguiente. Comparados con sistemas simplificados unidimensionales y aun con el átomo con un electrón, los átomos multielectrónicos son bastante complicados, pero pueden ser tratados de modo razonable utilizando una serie de aproximaciones sucesivas. Solamente las interacciones más importantes que experimentan los electrones atómicos serán tratadas en la primera aproximación y después, el tratamiento se hará más exacto, en las aproximaciones siguientes que tomen en cuenta las interacciones menos importantes. De este modo, el tratamiento se parte en una serie de pasos, ninguno de los cuales es muy difícil. Los resultados que se obtienen, ciertamente justificarán el esfuerzo invertido, ya que se tendrá un conocimiento detallado de los átomos, que son los constituyentes de todo en el universo. Además, resulta muy provechoso estudiar los procedimientos que se utilizan, por sí mismos, ya que son típicos de los utilizados al resolver los problemas reales de la ciencia y la ingeniería profesional, contrastando con los problemas artificiales de ciencia e ingeniería de los libros de texto.

En la primera aproximación que se emplea para tratar un átomo multielectrónico de *número atómico Z*, debe considerarse la interacción de Coulomb entre cada uno de sus Z electrones de carga $-e$ y su núcleo de carga $+Ze$. Dada la magnitud de la carga nuclear, ésta constituye la interacción mas fuerte que siente cada electrón. Pero aún en primera aproximación *deben considerarse también las interacciones entre cada electrón y los demás electrones del átomo*. Estas interacciones son individualmente más débiles que la interacción entre cada electrón y el núcleo, sin embargo, como ya se vió para el caso del átomo de helio en el ejemplo 9-4, de ningún modo son despreciables. Además, en un átomo multielectrónico típico, existen tantas interacciones entre un electrón y todos los demás electrones, que su efecto neto es muy fuerte, exceptuando el caso en que el electrón se encuentre muy cerca del núcleo, como se ilustra en la figura 9-8.

Por otra parte, la primera aproximación no debe ser tan complicada que la ecuación de Schrodinger resultante sea insoluble. En la práctica, este requisito implica que en un primer enfoque, *los electrones atómicos deben ser tratados como moviéndose independientemente*, de modo que el movimiento de un electrón no dependa del movimiento del resto. En ese caso, la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo puede separarse en un conjunto de ecuaciones, una para cada electrón que puede resolverse sin mucha dificultad puesto que solo involucra las coordenadas de un solo electrón. Obsérvese que ésta fué la forma como se obtuvieron las soluciones (9-3) de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, (9-1), para dos partículas moviéndose independientemente en una caja.

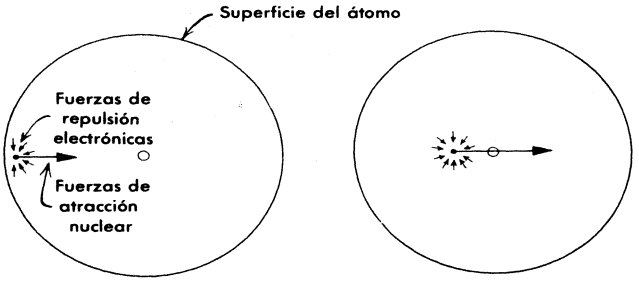


FIGURA 9-8

Izquierda: La intensa fuerza atractiva ejercida por el núcleo sobre un electrón cercano a la superficie de un átomo y las fuerzas repulsivas débiles ejercidas por los otros electrones. El efecto neto de las fuerzas repulsivas es importante porque tienden a reforzarse entre sí. *Derecha:* La muy intensa fuerza atractiva ejercida por el núcleo sobre un electrón cercano al centro de un átomo y las fuerzas repulsivas débiles ejercidas por los otros electrones. En este caso las fuerzas repulsivas tienden a cancelarse entre sí.

Entonces, se presenta un conflicto entre los requerimientos mencionados en los dos últimos párrafos; debe considerarse la interacción de Coulomb entre los electrones y al mismo tiempo los electrones deben ser tratados como moviéndose independientemente. Suponiendo que cada electrón se mueve *independiente* en un *potencial neto* $V(r)$, esféricamente simétrico, donde r es la coordenada radial del electrón respecto al núcleo, puede obtenerse concordancia entre esos dos requerimientos. El potencial neto es la suma del potencial de Coulomb atractivo esféricamente simétrico debido al núcleo, y el potencial de Coulomb repulsivo, esféricamente simétrico que representa el efecto *promedio* de las interacciones de Coulomb repulsivas entre un electrón típico y sus $Z-1$ vecinos. En la figura 9-8, puede observarse que cerca del centro del átomo, el comportamiento del potencial neto que actúa sobre un electrón, debería ser esencialmente como el potencial de Coulomb debido a la carga nuclear $+Ze$. La razón está en que en esta región las interacciones del electrón con los demás electrones, tienden a cancelarse. Puede observarse también en la figura que muy lejos del centro, el comportamiento del potencial neto deberá ser esencialmente como el debido a una carga neta $+e$, que representa a la carga nuclear $+Ze$, apantallada por la carga $-(Z\text{-}1)e$ de los demás electrones.

En el estudio de muchos campos de la física, se puede encontrar el procedimiento de introducir un potencial neto: por ejemplo, en el "modelo de capas", que proporciona una descripción sencilla pero útil, del comportamiento de neutrones y protones en un núcleo, como se verá en el capítulo 15.

Podría parecer que no existe una forma de encontrar el potencial neto de un átomo, a distancias intermedias del centro. El problema es que eso obviamente depende de los detalles de la distribución de carga de los electrones atómicos, y esto no puede saberse hasta que no se obtengan soluciones de la ecuación de Schrödinger que contiene al potencial neto. Sin embargo, ésto se soluciona requiriendo que el potencial neto sea *autoconsistente*. Es decir, si se calcula la distribución de carga electrónica a partir del potencial neto correcto y después de calcular el potencial neto a partir de esa distribución de carga, debe condicionarse a que el potencial resultante sea el mismo que el utilizado inicialmente. Como se verá, esta condición de autoconsistencia es suficiente para determinar el potencial neto correcto.

La mayor parte del trabajo en este campo ha sido realizada por Douglas Hartree y sus colaboradores, desde 1928 y continúa a la fecha. Implica resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un sistema de Z electrones que se mueven *independientemente* en

el átomo. Esta ecuación es análoga a la ecuación para dos electrones moviéndose independientemente en una caja, (9-1), en el sentido que el potencial atómico total, puede escribirse como una suma de un conjunto de Z potenciales netos $V(r)$ idénticos, cada uno de los cuales solo depende de la coordenada radial r, de un sólo electrón. Consecuentemente, la ecuación puede separarse en un conjunto de Z ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo, todas de la misma forma y cada una describiendo a un electrón que se mueve independientemente en su potencial neto. Una ecuación de Schrödinger independiente del tiempo típica para un electrón es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) + V(r)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{9-22}$$

En este caso r, θ, φ son las coordenadas polares esféricas del electrón típico; ∇^2 es el operador laplaciano en estas coordenadas, dada en (7-13); E es la energía total del electrón; $V(r)$ es el potencial neto; y $\psi(r,\theta,\varphi)$ es la eigenfunción del electrón. La energía total del átomo estará dada por la suma de estas Z energías totales. La eigenfunción total para el átomo se compone del producto de las Z eigenfunciones que describen el movimiento de los electrones que se mueven independientemente.

Inicialmente, no se conoce la forma exacta del potencial neto $V(r)$ que experimenta un electrón típico, pero puede determinarse siguiendo el tratamiento autoconsistente compuesto de los siguientes pasos:

1. Una primera estimación respecto a la forma de $V(r)$ puede obtenerse tomando

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} & r \to 0 \\ -\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} & r \to \infty \end{cases} \tag{9-23}$$

y una interpolación razonable de los valores intermedios de r. Esta estimación o primer intento se basa en la idea, antes mencionada, de que muy cerca del núcleo, la atracción de Coulomb completa de las $+Ze$ cargas afecta al electrón, mientras que si el electrón está lejos del núcleo, siente solo una carga neta $+e$, ya que la carga nuclear queda apantallada por la carga $-(Z-1)e$ de los otros electrones que rodean el núcleo.

2. Se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para un electrón típico, (9-22), utilizando el potencial neto $V(r)$ que se obtuvo en el paso anterior. Esto no es fácil de realizar, pusto que la parte radial de la ecuación debe resolverse por integración numérica, como en el apéndice F, ya que $V(r)$ es una función complicada. Las eigenfunciones para un electrón típico que se encuentran en este paso son: $\psi_\alpha(r,\theta,\varphi)$, $\psi_\beta(r,\theta,\varphi)$, $\psi_\gamma(r,\theta,\varphi)$, ... En la lista aparecen por orden creciente de energías de los correspondientes eigenvalores E_α, E_β, E_γ, ... Cada uno de los símbolos α, β, γ, ..., está en lugar del conjunto completo de números cuánticos del electrón, tres espaciales y uno de spin.

3. Para obtener el estado base del átomo, los estados cuánticos de sus electrones se van llenando de tal modo, que la energía total sea mínima y que al mismo tiempo se satisfaga la condición más débil del principio de exclusión. Es decir, los estados se llenan por orden creciente de energía, con un electrón en cada estado, como se ilustra esquemáticamente en la figura 9-9. Entonces, la eigenfunción correspondiente al primer electrón será $\psi_\alpha(r_1,\theta_1,\varphi_1)$, la eigenfunción para el segundo será $\psi_\beta(r_2,\theta_2,\varphi_2)$, y así sucesivamente a lo largo de las Z eigenfunciones correspondientes a los Z eigenvalores más bajos obtenidos en el paso anterior.

4. Con las eigenfunciones obtenidas en el paso anterior, se calculan las distribuciones de carga electrónica del átomo. Esto se realiza tomando como distribución de carga del electrón, el producto de su carga $-e$ por la función densidad de probabilidad $\psi^*\psi$. Esto se justifica porque $\psi^*\psi$ determina la probabilidad de que la carga se encuentre en varios lugares del átomo.

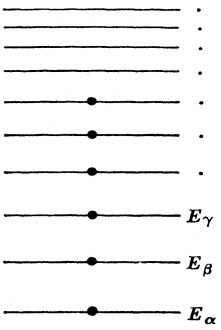


FIGURA 9-9

Diagrama esquemático de niveles de energía que ilustran el efecto del principio de exclusión de limitar la población de cada estado cuántico de un átomo con seis electrones. Obsérvese que la energía total del átomo sería mucho más negativa si no operara el principio de exclusión. El diagrama no indica que muchos estados cuánticos son realmente degenerados, ni se ha intentado que el espaciamiento entre los niveles sea realista.

Para determinar la distribución de carga total del átomo, vista por un electrón típico, es necesario sumar las distribuciones de carga de $Z - 1$ electrones representativos a la distribución de carga nuclear, tomada como carga puntual $+Ze$ colocada en el origen.

5. La distribución de carga total, que se obtuvo en el paso anterior es utilizada para calcular el campo eléctrico que produce, mediante la ley de Gauss de electrostática. En seguida, se calcula la integral de este campo eléctrico para obtener una estimación más precisa del potencial neto $V(r)$ que experimenta un electrón típico. Generalmente, esta nueva $V(r)$ es diferente de la que se estimó en el paso 1.

6. Si el potencial resulta apreciablemente diferente, se repite todo el procedimiento empezando en el paso 2, utilizando la nueva $V(r)$. Después de varios ciclos $(2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow \cdots)$ la $V(r)$ que se obtiene al final de un ciclo es esencialmente la misma que la que se usó en el principio y ésta $V(r)$ es el potencial neto autoconsistente, de modo que las eigenfunciones calculadas a partir de este potencial describirán los electrones en el estado base de un átomo multielectrónico.

En el procedimiento de Hartree, la condición más débil del principio de exclusión se satisface por el requisito del paso 3, de que solo un electrón se encuentre en un estado cuántico. Sin embargo, la condición más fuerte no se satisface, puesto que no se utilizan eigenfunciones totales antisimétricas. Esto se debe a que una eigenfunción antisimétrica implicaría una combinación lineal de $Z! = Z(Z - 1)\ (Z - 2) \ldots 1$ términos; que resulta ser un número muy grande para la mayoría de los átomos, excepto aquellos de Z muy pequeña. El procedimiento ya es, en sí, bastante complicado, y el uso de eigenfunciones antisimétricas lo haría aún más difícil. De cualquier forma, el efecto principal de emplear eigenfunciones antisimétricas totales sería disminuir la distancia entre ciertos pares de electrones y aumentarla entre otros, dejando la distribución de carga electrónica promedio, esencialmente invariable. Como en la aproximación de Hartree, la cantidad más importante es la distribución de carga electrónica promedio, el usar eigenfunciones que no tienen una simetría definida no introduce errores significativos. Lo anterior ha sido verificado por Fock, quién realizó cálculos con eigenfunciones totales antisimétricas, para un número de átomos restringido, y comparó sus resultados a los obtenidos por Hartree. Sin embargo, en el siguiente capítulo, cuando se estudien los estados excitados de los átomos, será necesario tomar en cuenta el hecho de que la eigenfunción total antisimétrica es la que debe emplearse si se desea hacer una descripción completa y acertada de un sistema de electrones. Los cálculos de Fock, y los que se considerarán en el siguiente capítulo son factibles, porque realmente solo es necesario antisimetrizar aquella parte de la eigenfunción total que describe el comportamiento de un limitado número de electrones en una "subcapa parcialmente llena", como se verá más adelante.

Es interesante recordar, desde el punto de vista histórico, que una de las primeras computadoras digitales grandes, fué utilizada para realizar los cálculos de Hartree. Utilizaba "relays" como elementos interruptores, en lugar de los transistores en las computadoras

modernas. Pero aún es computadoras modernas, es tan grande el tiempo que se consume, que los resultados correspondientes a una gran variedad de átomos fueron obtenidos sólo hasta los años 60, por Herman y Skilman. Estos resultados proporcionan una explicación muy satisfactoria de las características esenciales de todos los átomos multielectrónicos en sus estados base. Como se verá, la explicación no es demasiado complicada.

9.6 Resultados de la teoría de Hartree

Las eigenfunciones que se encuentran en la teoría de Hartree para electrones en el potencial neto de simetría esférica de un átomo multielectrónico, están muy relacionadas con las eigenfunciones que se discutieron en el capítulo 7 correspondientes al átomo con un solo electrón. De hecho, las eigenfunciones de Hartree se pueden escribir como:

$$\psi_{nlm_lm_s}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi)(m_s) \qquad (9\text{-}24)$$

Las eigenfunciones están identificadas por el mismo conjunto de números cuánticos n, l, m_l, m_s, que se utilizaron para las eigenfunciones del átomo con un electrón. La eigenfunción de spin, denotada por (m_s), es exactamente igual a la correspondiente al átomo con un electrón. Además, las funciones que describen la dependencia angular $\Theta_{lm_l}(\theta)$ y $\Phi_{m_l}(\varphi)$, también son exactamente las mismas. Esto se debe a que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para un electrón en un potencial neto esféricamente simétrico (9-22), tiene una forma exactamente igual que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un electrón en el potencial de Coulomb esféricamente simétrico, (7-12), por lo que corresponde a θ y φ . Por lo tanto, (9-22) conduce directamente a (7-15) y (7-16), cuyas soluciones son $\Theta_{lm_l}(\theta)$ y $\Phi_{m_l}(\varphi)$. Consecuentemente, *todo el análisis del capítulo 7, respecto a la dependencia con θ y φ de las eigenfunciones de un electrón en un átomo monoelectrónico, es aplicable directamente a la dependencia de las eigenfunciones de un electrón en un átomo multielectrónico con θ y φ* .

Como ejemplo, en (7-32) se muestra que la suma de las densidades de probabilidad relacionadas con las eigenfunciones del átomo con un electrón, para $n = 2$, $l = 1$, y todos los valores posibles de m_l es esféricamente simétrica. Desde luego que esta afirmación también es válida para $n = 2$, $l = 0$ y su validez puede demostrarse para cualquier valor de n y l. Del análisis anterior puede concluirse que esa afirmación debe aplicarse también a las eigenfunciones de átomos multielectrónicos. Ahora bien, cuando un átomo multielectrónico se encuentra en su estado base, los estados cuánticos de energía más baja, se encuentran completamente llenos, lo que quiere decir que para casi todos los valores de n y l existen electrones en estados con todos los posibles valores de m_l. Como la suma de las densidades de probabilidad, para estos electrones, es esféricamente simétrica, su distribución de carga total también lo es. A lo más, solo unos cuantos electrones, en los estados de energía más alta, para los cuales podría ser que no todos los estados correspondientes a todos los valores posibles de m_l estén llenos, podrán contribuír a cualquier asimetría en la distribución de carga. En el paso 4 del procedimiento de Hartree, la distribución de carga se toma como totalmente esféricamente simétrica; es decir, es el mejor ajuste de una distribución esféricamente simétrica a la distribución que realmente se obtiene.

La dependencia en r de las eigenfunciones para un electrón en un átomo multielectrónico, no es igual que para un electrón en un átomo con un solo electrón. Esto se debe a que el potencial neto $V(r)$ que interviene en la ecuación diferencial que determina las funciones $R_{nl}(r)$, no tiene la misma dependencia en r que el potencial de Coulomb. En la figura 9-10, se muestran ejemplos típicos del comportamiento radial de las eigenfunciones de átomos multielectrónicos. En la figura se muestran los resultados de un cálculo tipo Hartree para el átomo de argón, $Z = 18$, en términos de las cantidades $2(2l + 1)r^2R_{nl}^2(r) = 2(2l + 1)P_{nl}(r)$ donde $P_{nl}(r)$ es la *densidad de probabilidad radial* de (7-28), que satisface la probabilidad de encontrar un electrón, con números cuánticos n y l, y en una posición con probabilidad radial cercana a r. Como

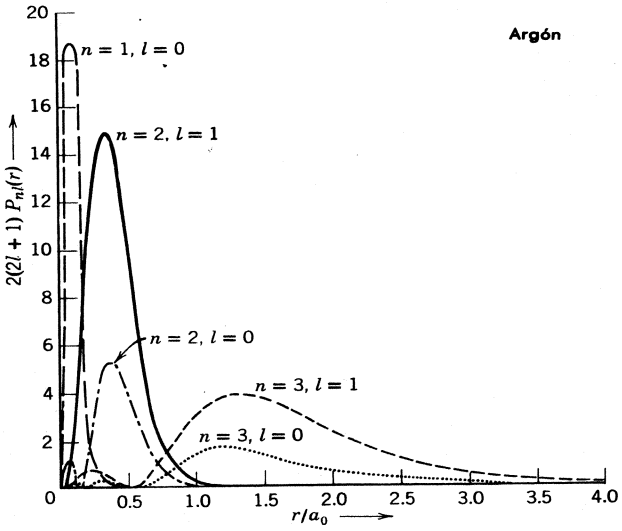


FIGURA 9-10

Densidades de probabilidad radial, de la teoría de Hartree para los estados cuánticos ocupados del átomo de argón, graficados como función de r/a_0, la coordenada radial en unidades del radio de la primera órbita de Bohr del átomo de hidrógeno, a_0. Para cada n la densidad de probabilidad se concentra en un intervalo restringido de valores de r/a_0, llamado capa. Obsérvese que el radio característico de la capa más externa ($n = 3$) tiene un valor de r/a_0 solo ligeramente mayor que 1.0, mientras que el radio característico de la capa más interna ($n = 1$) tiene un valor de r/a_0 mucho menor que 1.0. Es decir, la capa más externa del argón es solo ligeramente mayor en radio que a_0, que es el radio de la única capa del hidrógeno. La capa más interna del argón tiene un radio mucho menor que la capa del hidrógeno.

existen $(2l + 1)$ valores posibles de m_l por cada l, y como para cada uno de estos existen 2 valores posibles de m_s, la cantidad $2(2l + 1)P_{nl}(r)$ es la densidad de probabilidad radial para los estados cuánticos con números cuánticos n y l, por el número total de electrones que el principio de exclusión permite que ocupen esos estados. En el estado base del argón, dos electrones ocupan el estado para $n = 1$, $l = 0$; dos para $n = 2$, $l = 0$; seis para $n = 2$, $l = 1$; dos para $n = 3$, $l = 0$; y seis para $n = 3$, $l = 1$. Estos son los estados que se encuentran llenos en el estado base del átomo, porque como se vió antes, son los de menor energía.

En la figura 9-11 se muestra *la densidad de probabilidad radial total* $P(r)$, para el átomo de argón, que corresponde a la suma de la densidad de probabilidad radial para cada estado, tomada sobre los valores de n y l ocupados en el átomo, por el número de electrones contenido en cada uno de dichos estados. Es decir, $P(r)$ determina la probabilidad de encntrar *algún* electrón con coordenada radial en la vecindad de r.

En la figura 9-11 se muestra también la dependencia radial del potencial neto $V(r)$ en el cual se mueve cada electrón del átomo de argón, que se obtiene de un cálculo tipo Hartree para ese átomo. El potencial neto no se presenta directamente sino que indirectamente en términos de una cantidad conveniente $Z(r)$ por medio de la relación

$$V(r) = -\frac{Z(r)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \qquad (9\text{-}25)$$

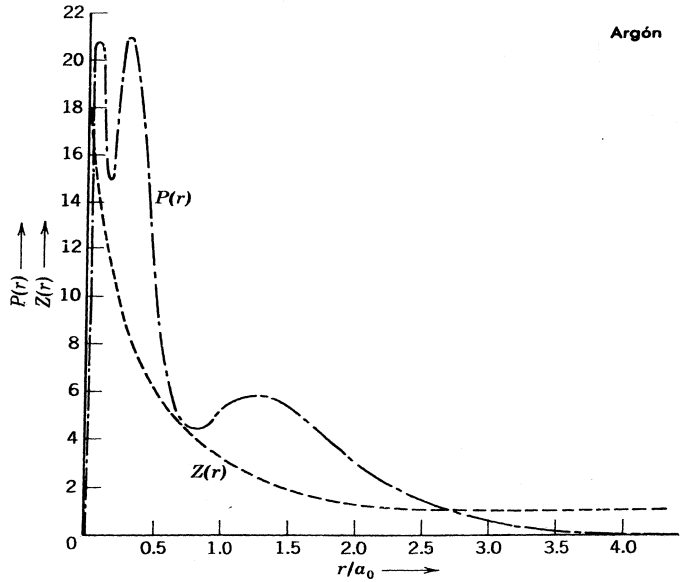


FIGURA 9-11

Densidad de probabilidad radial total $P(r)$ del átomo de argón y la cantidad $Z(r)$ que especifica su potencial neto.

Obsérvese que la figura muestra $Z(r) \to Z$ cuando $r \to 0$, y $Z(r) \to 1$ cuando $r \to \infty$, en concordancia con las ideas estudiadas en (9-23).

Examinando las gráficas de $P_{nl}(r)$ de la figura 9-10, puede observarse que, para los electrones en estados cuyo número cuántico n tiene un valor común, las densidades de probabilidad son grandes, esencialmente en el mismo intervalo de r. Se dice que estos electrones se encuentran en la misma *capa,* terminología que ya se usó anteriormente en relación con átomos de un solo electrón. Además, el intervalo de r para el cual las densidades de probabilidad son grandes (la "anchura" de cada capa) se restringe lo suficiente como para que $Z(r)$ tenga un valor razonablemente bien definido en ese intervalo.

Estas circunstancias constituyen la base de una aproximación que, aunque burda, resulta útil para describir los resultados de la teoría de Hartree, en la cual los electrones de la capa identificada por n, en un átomo multielectrónico, son considerados como moviéndose en un potencial de Coulomb

$$V_n(r) = -\frac{Z_n e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{9-26}$$

donde Z_n es una constante igual a $Z(r)$ calculada en el valor promedio de r para la capa (es decir, "el radio" de la capa). En la simple aproximación de (9-26), las ecuaciones que especifican la energía total y otras cantidades de interés en el átomo con un electrón, pueden ser utilizadas si se sustituye Z por Z_n. Frecuentemente, a la cantidad Z_n se le llama la Z *efectiva* para la capa. Esta aproximación es útil, porque permite estudiar muchos resultados de la teoría de Hartree, en términos de ecuaciones muy simples, con propiedades fácilmente comprensibles, a pesar de que la teoría de Hartree en la realidad, maneja procedimientos numéricos que conducen a resultados que deben ser expresados en tablas o gráficas complicadas.

Ejemplo 9-5. Determinar los valores de Z_n para el átomo de argón y utilice estos valores para estimar la energía total de los electrones de las tres capas que se encuentran ocupadas en el estado base del átomo.

Examinando la figura 9-11 para estimar los valores promedio de r, característicos de las capas ocupadas, obteniendo de la misma figura los valores de $Z(r)$ correspondientes a esas Z_n e igualando esos valores de $Z(r)$, con Z_n se encuentra que para el átomo de argón con $Z = 18$.

$$Z_1 \simeq 16 \quad \text{y} \quad Z_2 \simeq 8 \quad \text{y} \quad Z_3 \simeq 3$$

Como ya se indicó antes, la fórmula para el átomo con un electrón, (7-22), puede ser utilizada, sustituyendo $Z = Z_n$

$$E \simeq -\frac{\mu Z_n^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = -\left(\frac{Z_n}{n}\right)^2 \times 13.6 \text{ eV}$$

y se obtiene una estimación de las energías electrónicas que se obtendrían de cálculos con la teoría de Hartree. Realizando lo anterior se obtiene

$$E_1 \simeq -\left(\frac{16}{1}\right)^2 \times 13.6 \text{ eV} = -3500 \text{ eV}$$

$$E_2 \simeq -\left(\frac{8}{2}\right)^2 \times 13.6 \text{ eV} = -220 \text{ eV}$$

$$E_3 \simeq -\left(\frac{3}{3}\right)^2 \times 13.6 \text{ eV} = -14 \text{ eV}$$

Estas energías concuerdan, dentro de un 20% con los resultados de Hartree. ◀

En el ejemplo 9-5 se encontró que para el átomo de argón, con $Z = 18$, la Z efectiva para la capa más profunda ($n = 1$) es $Z_1 \simeq 16$. Los cálculos tipo Hartree demuestran que en *todos los átomos multielectrónicos* Z_1 *tiene un valor de aproximadamente* $Z_1 \simeq Z - 2$. Esto se debe a que en todos los átomos, una esfera en torno al núcleo, con radio igual a la coordenada radial promedio de un electrón en la capa $n = 1$ contiene una carga negativa aproximadamente de $-2e$, debido a la distribución de carga de los demás electrones. De acuerdo con la ley de Gauss de electrostática, esta distribución de carga negativa esféricamente simétrica, apantalla el electrón $n = 1$ de parte de la carga nuclear $+Ze$, reduciéndola de modo efectivo a aproximadamente $+Ze - 2e = +(Z - 2)e$. Por lo tanto, el electrón en $n = 1$ experimenta una Z efectiva de aproximadamente $Z_1 = Z - 2$.

En el ejemplo 9-5 también se encontró que para la capa más externa del átomo de argón ($n = 3$ para ese átomo), la Z efectiva tiene el valor pequeño $Z_n \simeq 3$. La razón para ésto es que el electrón en la capa más externa, queda casi completamente escudado de la carga nuclear, por la intervención de las distribuciones de carga de los otros electrones. El resultado es comparable con lo que se encuentra en todos los cálculos tipo Hartree. Sin embargo, a medida que Z aumenta los valores de Z_n que se obtienen de los cálculos para la capa más externa, también aumentan lentamente, es decir, aumenta casi tan lentamente como la n misma. La razón por la que aumenta es que el escudo que presentan a la carga nuclear, los electrones de las capas que intervienen no es perfecto. Dentro de la aproximación simple que se ha considerado y con una precisión consistente con dicha aproximación, los resultados pueden expresarse diciendo que *en todos los átomos multielectrónicos* Z_n *tiene un valor de aproximadamente* $Z_n \simeq n$, *si n especifica la capa ocupada más externa en el átomo.*

En seguida, se utilizarán los hechos enunciados en los últimos dos párrafos, para describir y explicar un gran número de reglas importantes de la teoría de Hartree:

1. En átomos multielectrónicos, las capas profundas de n pequeña son de radio muy pequeño, ya que en estas capas el apantallamiento es pequeño, y los electrones son afectados por la atracción de Coulomb completa del núcleo altamente cargado. De hecho, la teoría de Hartree predice que el radio de la capa con $n = 1$ es más pequeño que la capa $n = 1$ de hidrógeno por un factor de aproximadamente $1/(Z - 2)$. (Esta predicción no es muy exacta para átomos de Z muy grande debido a los efectos relativistas que no se toman en cuenta en la teoría de Hartree y que se vuelven importantes porque los electrones de capas profundas en átomos con Z grande, tienen energías comparables con sus energías de masa en reposo $mc^2 \simeq 5 \times 10^5$ eV). Esta predicción puede entenderse en la descripción simple de los resultados de la teoría de Hartree, igualando $Z = Z_1 \simeq Z - 2$ en la ecuación para el valor esperado de la coordenada radial del átomo con un electrón (7-29), a saber;

$$\bar{r} \simeq \frac{n^2 a_0}{Z}$$

que resulta

$$\bar{r} \simeq \frac{\bar{r}_{\text{hidrógeno}}}{Z_1} \simeq \frac{\bar{r}_{\text{hidrógeno}}}{Z - 2}$$

2. Los electrones en las capas profundas o internas se encuentran en una región de energía potencial negativa grande, de modo que sus energías totales correspondientes también son negativas y grandes. Los resultados de la teoría de Hartree predicen que la *magnitud de la energía total de un electrón en la capa n = 1 es más negativa que la correspondiente a un electrón en la capa n = 1 del átomo de hidrógeno,* por un factor de aproximadamente $(Z - 2)^2$. (Los efectos relativistas limitan la precisión en el caso de Z grande). Lo anterior puede entenderse si se iguala $Z = Z_1 \simeq Z - 2$ en la ecuación para la energía del átomo con un solo electrón. (7-22)

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2}$$

de donde se obtiene

$$E \simeq Z_1^2 E_{\text{hidrógeno}} \simeq (Z - 2)^2 E_{\text{hidrógeno}}$$

3. Los electrones de las últimas capas para n grande, quedan casi completamente escudados del núcleo, de modo que experimentan una atracción por el núcleo no muy diferente de la que experimenta un electrón por el núcleo de carga unitaria del átomo de hidrógeno. El radio de la capa más externa puede obtenerse en la descripción simple, igualando $Z = Z_n \simeq n$ en la ecuación para el valor de expectación radial del átomo con un electrón, de donde se obtiene,

$$\bar{r} \simeq \frac{n^2 a_0}{Z_n} \simeq \frac{n^2 a_0}{n} \simeq n a_0$$

Se puede encontrar que las predicciones de esta ecuación, sobreestiman por un factor de 2, los resultados reales de Hartree para el átomo de argón que se muestran en la figura 9-10. Esta misma sobreestimación de un factor de 2 se encuentra en una comparación similar con los resultados de Hartree para elementos con el número atómico más grande. La descripción de Z efectiva de los resultados de Hartree es burda, sin embargo, lo suficientemente útil para describir correctamente el hecho de que *el radio de la capa llena más externa aumenta muy lentamente conforme aumenta el número atómico.* Los mismos resultados de Hartree demuestran que *este radio es solo tres veces más grande en los elementos de mayor número atómico que en el hidrógeno.*

La afirmación anterior puede aplicarse directamente al tamaño de los átomos, ya que el radio de la capa llena más externa es esencialmente igual al radio del átomo. De cualquier forma, es un error muy común pensar que átomos con número atómico muy grande son mucho más grandes que átomos con número atómico pequeño. Las medidas efectuadas en átomos, moléculas y sólidos demuestran que ésto no es cierto. La teoría de Hartree explica que no es cierto, básicamente porque a medida que la carga nuclear Z aumenta de un átomo a otro, las capas electrónicas internas, se contraen rápidamente.

4. De esta simple descripción de los resultados de la teoría de Hartree, se puede ver que la teoría predice que *la energía total de un electrón en la capa llena más externa de cualquier átomo, es comparable con la de un electrón en el estado base del hidrógeno.* Si se hace $Z = Z_n$ en la ecuación para la energía de un átomo con un electrón, se obtiene

$$E \simeq -\frac{\mu Z_n^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \tag{9-27}$$

y si se sustituye $Z_n \simeq n$, se obtiene una energía que aproximadamente, es igual a la del estado base del átomo de hidrógeno. La razón básica para lo anterior se encuentra en el apantallamiento que sufren los electrones de las capas más externas, de la carga nuclear completa, por la intervención de los electrones de las capas internas.

5. Por último, (9-27) puede utilizarse para describir la dependencia de la energía total de un electrón, en un átomo *dado,* con su número cuántico n. Debido tanto a la Z_n^2 que aparece en el numerador, como a la n^2 en el denominador, E se hace menos negativa a medida que n aumenta al recorrer las capas de un átomo dado. *La energía total de un electrón en un átomo multielectrónico dado, se vuelve menos negativa muy rápidamente a medida que n aumenta para n pequeña, pero menos rápidamente para n grande.* El comportamiento para n grande refleja el hecho de que la energía del electrón no puede ser positiva ya que el electrón está ligado. Esta predicción de la teoría de Hartree y las ya mencionadas, se verifican experimentalmente.

Para concluir el estudio de los resultados de la teoría de Hartree, se describirán sus predicciones de las energías totales de los electrones atómicos, con mayor precisión de la que sería posible con base en la descripción burda que se ha utilizado. En un átomo con un electrón, los estados cuánticos correspondientes a cierta capa tienen exactamente la misma energía total, si se desprecia la energía correspondiente a la interacción spin órbita. Es decir, los estados de una capa, correspondiente a una n particular, son *degenerados,* ya que su energía total sólo depende de n. Sin embargo, este no es el caso para un átomo multielectrónico. Como se mencionó en 7-5, el hecho de que la energía total de un electrón en un átomo monoelectrónico, no depende de l en consecuencia del hecho de que su potencial es de Coulomb, es decir, exactamente proporcional a $-1/r$. En un átomo multielectrónico, los electrones se mueven en un potencial neto $V(r)$ que definitivamente no es proporcional a $-1/r$, y, por lo tanto, la energía total de estos electrones depende tanto de l como de n. (Como se está ignorando la interacción spin-órbita y ciertas otras interacciones débiles, la energía total de los electrones no depende del número cuántico m_s que determina la orientación espacial del spin, ni del número cuántico m_l que determina la orientación en el espacio de la "órbita").

Los resultados de la teoría de Hartree demuestran que la energía de un electrón atómico, es un poco más negativa de lo que se esperaría de acuerdo con (9-27), la ecuación para la energía que se obtuvo siguiendo la descripción burda de la teoría. La diferencia es mayor, para $l = 0$, y disminuye progresivamente cuando l crece. Por lo tanto, en la aproximación de Hartree, la energía de un electrón en un átomo multielectrónico, se denota por E_{nl}, para indicar que depende tanto de n como de l.

La dependencia con l se explica en términos del comportamiento de la densidad de probabilidad electrónica $\psi^*\psi$, en la región correspondiente a r pequeña próxima al núcleo de átomo multielectrónico. De acuerdo con (7-31)

$$\psi^*\psi \propto r^{2l} \qquad r \to 0$$

Lo anterior ha sido demostrado para las eigenfunciones del átomo con un electrón, pero es igualmente válido para eigenfunciones de átomos multielectrónicos. La razón para esto puede verse analizando la figura (7-17), que corresponde a la ecuación diferencial para la función R que gobierna el comportamiento radial de las eigenfunciones. Obsérvese que cuando $r \to 0$ el término $[l(l+1)/r^2]R$ domina completamente al otro término, $(2\mu/\hbar^2)[E - V(r)]R$ ya que el factor $1/r^2$ lo hace crecer tan rápidamente a medida que r decrece para r pequeña. En consecuencia, para r pequeña, la forma exacta de $V(r)$ no importa, siempre y cuando su magnitud aumente menos rápidamente que $1/r^2$. En *todos* los átomos, las eigenfunciones tienen una dependencia radial proporcional a r^l para r, pequeña y, por lo tanto, la densidad de probabilidad es proporcional a r^{2l} para r pequeña. Así por ejemplo, si se consideran dos electrones en la misma capa n de un átomo multielectrónico, uno con $l = 0$ y el otro con $l = 1$, existe mayor probabilidad de encontrar el electrón con $l = 0$ en la región de r pequeña, que encontrar el electrón con $l = 1$ en esa región. Esto es válido puesto que $r^0 \gg r^2$ para r pequeña. Similarmente es más probable encontrar un electrón con $l = 1$ que un electrón con $l = 2$ con la misma n y r pequeña, ya que $r^2 \gg r^4$, etc. Esta propiedad puede verse examinando cuidadosamente la figura 9-10.

Antes de utilizar la propiedad que explica la dependencia de E_{nl} con l, se indicará su origen físico desarrollando un argumento semiclásico que implica la figura 9-12. Un electrón con número cuántico l tiene un impulso angular de magnitud fija dada por $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$. Sin

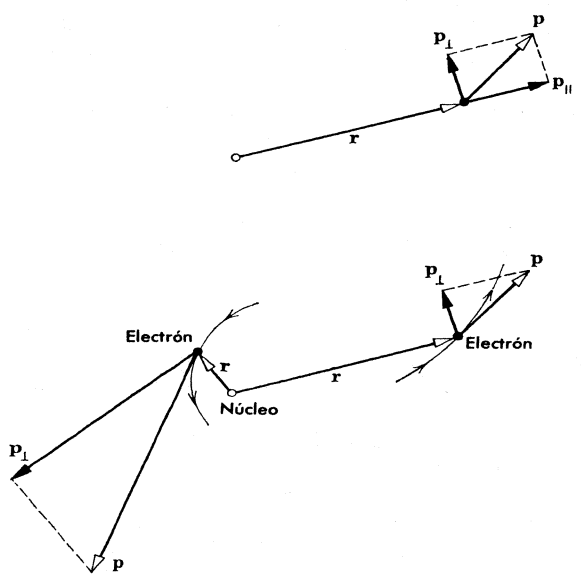


FIGURA 9-12

Arriba: El impulso lineal **p** de un electrón puede descomponerse en una componente $p_{\parallel}$ paralela al vector radial desde el núcleo r, y una componente $p_{\perp}$ perpendicular al vector radial. El producto de $p_{\perp}$ por r es igual a la magnitud constante del impulso angular L. Cuando el electrón se encuentra relativamente cercano al núcleo (ilustrado a la izquierda), r es pequeña de modo que $p_{\perp}$ debe ser grande. Cuando el electrón se encuentra relativamente lejos (ilustrado a la derecha) $p_{\perp}$ es pequeña. Obsérvese que la magnitud del impulso total p será grande también cuando $p_{\perp}$ sea grande, por lo tanto, la energía cinética del electrón será grande cuando se encuentre cerca del núcleo con el fín de permitir que el impulso angular sea una constante del movimiento.

nbargo, $L = rp_\perp$, donde $p_\perp$ es la magnitud de su componente de impulso lineal perpendicular vector de la coordenada radial cuya longitud es r. Si el electrón se mueve en la región onde r es pequeña, entonces $p_\perp$ deberá ser grande. Como la energía cinética del electrón K, ontiene un término proporcional a $p_\perp^2$, éste se vuelve más positivo a medida que r disminuye n la proporción $1/r^2$, para r pequeña. Sin embargo, para r pequeña, el potencial neto tiende l potencial de Coulomb de una carga nuclear sin pantalla, de modo que la energía potencial V el electrón se hace más negativa, a medida que r disminuye, en proporción $1/r$. Como $K \propto +1/r^2$ y $V \propto -1/r$ para r, pequeña, su energía cinética aumenta más rápidamente que lo que su energía potencial disminuye, cuando $r \to 0$. Por lo tanto, el electrón trata de evitar esa región puesto que no puede mantener un valor constante de su energía total $E = K + V$, como lo demanda la conservación de la energía, sin embargo, la tendencia a evitar la región correspondiente a r pequeña, no se presenta para $l = 0$ ya que entonces $L = 0$. Por lo tanto, es más probable encontrar un electrón con $l = 0$ para r pequeña que encontrar en esa región un electrón con $l = 1$ Como la tendencia a evitar la región de r pequeña es más pronunciada a medida que l, aumenta, existe mayor probabilidad de encontrar un electrón con $l = 1$ que con $l = 2$ en la región de r, pequeña, etc.

Ahora sí es posible entender la dependencia en E_{nl} con l. La descripción escueta de los resultados de la teoría de Hartree subestima qué tan negativa es la energía total de un electrón atómico, ya que supone que el electrón se mantiene dentro de una capa dada. De hecho, existe una probabilidad pequeña de que el electrón se encuentre dentro de su capa, en la región de r pequeña, próxima al núcleo. Cuando el electrón se encuentra en esta región, ha penetrado la distribución de carga de los otros electrones, y siente la casi total carga nuclear sin apantallamiento; entonces, posee una energía potencial *mucho* más negativa que la que tiene dentro de su capa. Ocasionalmente, el electrón podrá encontrarse fuera de su capa, donde su energía potencial es menos negativa que en su capa, pero el cambio es considerablemente más pequeño que el cambio de energía potencial que ocurre cuando se encuentra por dentro de la capa. **El efecto general del movimiento del electrón dentro y fuera de su capa es hacer el valor de expectación de su energía potencial un tanto más negativa y, por lo tanto hacer que su** energía total sea un tanto más negativa de lo que sería si se mantuviera en su capa. Como ya se vió que la probabilidad de un electrón, con una n dada, de estar dentro de la capa cerca del núcleo es mayor, cuanto menor sea su l, puede verse que para un valor dado de n, *la energía* total E_{nl} *de un electrón en un átomo multielectrónico es más negativa para* $l = 0$ *que para* $l = 1$, *más negativa para* $l = 1$ *que para* $l = 2$, *etc.* Para capas más extremas, con valores mayores de n donde la dependencia con n no es muy fuerte, los valores de E_{nl} podrán depender más sensiblemente de l que de n. Sin embargo, para el átomo con un electrón, la energía total no depende en absoluto de l puesto que nunca existe apantallamiento y el electrón siempre siente la carga nuclear total y el valor de expectación de su energía potencial es independiente de l.

Los electrones en una capa particular poseen densidades de probabilidad radial que aproximadamente son de la misma forma en la región de la capa, pero que son significativamente diferentes en la región de r pequeña. Ya se vió que la segunda propiedad ocasiona que las energías totales de los electrones en la capa dependen de l. En consecuencia, resulta conveniente considerar que cada capa se compone de cierto número de subcapas, una para cada valor de l. Los electrones en la misma subcapa tienen los mismos números cuánticos n y l. por lo tanto, todos poseen exactamente la misma energía (en la aproximación de Hartree, que ignora la interacción spin-órbita y otras interacciones débiles). Asimismo, todos los electrones en la misma subcapa, tienen la misma densidad de probabilidad radial $P_{nl}(r)$.

9.7 Estado base de átomos multielectrónicos y la tabla periódica

Las propiedades de los elementos químicos, en su mayoría son funciones periódicas del número atómico Z que especifica el número de electrones en un átomo del elemento. Mendeleev, en 1869, fue el primero en hacer énfasis en que dicha periodicidad puede hacerse más evidente,

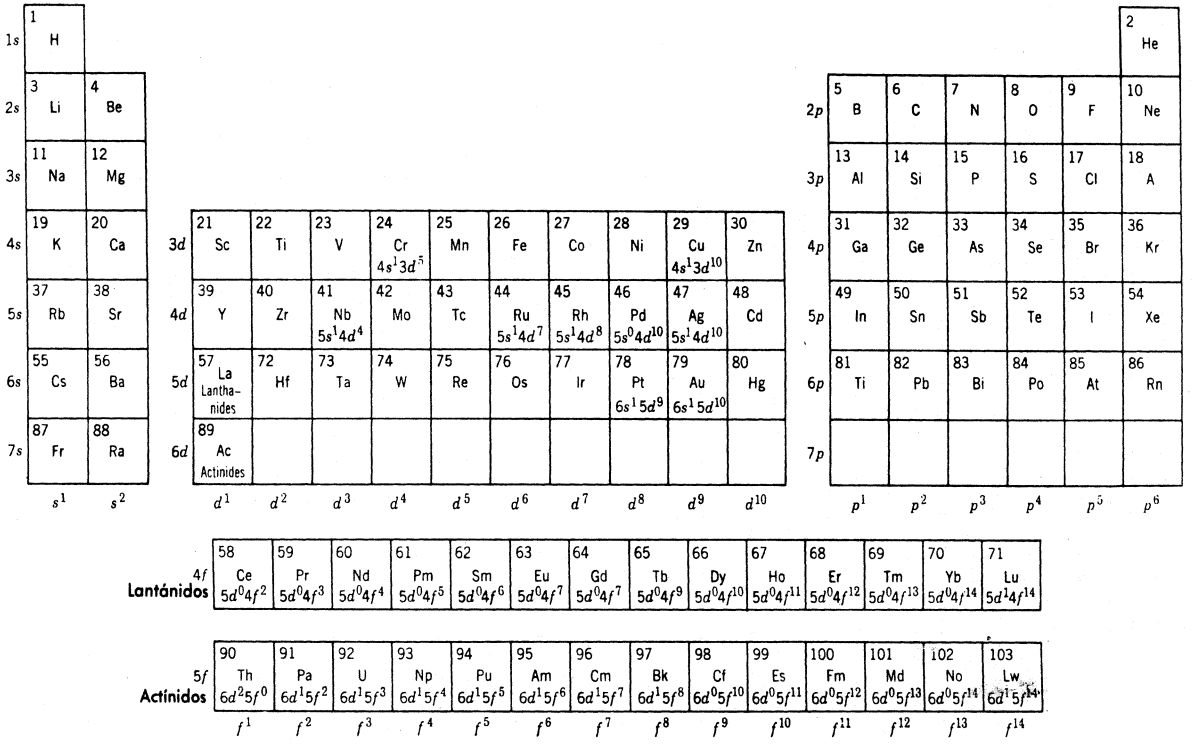


FIGURA 9-13

Tabla periódica de los elementos mostrando la configuración electrónica para cada elemento.

construyendo una *tabla periódica* de los elementos. Una versión moderna de su tabla se presenta en la figura 9-13. En esa tabla, cada elemento está representado por su símbolo químico y por su número atómico. Los elementos con propiedades físicas y químicas similares, se encuentran en la misma columna. Por ejemplo, todos los elementos de la primera columna son alcalinos y tienen valencia más uno; todos los elementos en la última columna son gases nobles y tienen valencia cero. El descubrimiento de la tabla periódica representó un gran avance de la química, mientras que su interpretación fué un desarrollo de significación equivalente para la física.

Se supondrá que el estudiante está familiarizado con las propiedades periódicas de los elementos por sus estudios de la química elemental y por esta razón no será necesario hacer énfasis en su importancia para la química. En este punto, la tarea será interpretar estas propiedades en base a la teoría de Hartree de átomos multielectrónicos. Es decir, en esta sección se presentará la interpretación mecánico-cuántica de las bases de la química inorgánica, además de una buena parte de la química orgánica y de la física del estado sólido.

La interpretación de la tabla periódica se basa en la información acerca del ordenamiento de acuerdo con la energía de las subcapas llenas más externas de los átomos multielectrónicos. La información deseada puede obtenerse de los resultados de los cálculos de Hartree, descritos en la sección anterior, de donde se obtiene el ordenamiento de acuerdo con la energía de las subcapas llenas más externas, como se muestra en la tabla 9-2. La primera columna identifica la subcapa por medio de los números cuánticos n y l.

En la segunda columna de la tabla 9-2, se identifica la subcapa por medio de la *notación espectroscópica* correspondiente a n y l. Esta notación es de uso común en el estudio de espectros y niveles de energía de átomos. El número indica el valor de n, y la letra indica el valor de l de acuerdo con el esquema que se muestra en la tabla 9-3. En este esquema el estado correspondiente a $l = 0$ es llamado estado s el estado correspondiente a $l = 1$ es llamado estado p etc.

TABLA 9-2 Ordenamiento de energía de las subcapas llenas más externas.

Números cuánticos n, l	Designación de la subcapa	Capacidad de la subcapa $2(2l + 1)$	
—	—	—	
—	—	—	
6, 2	6*d*	10	
5, 3	5*f*	14	
7, 0	7*s*	2	
6, 1	6*p*	6	
5, 2	5*d*	10	
4, 3	4*f*	14	
6, 0	6*s*	2	↑
5, 1	5*p*	6	
4, 2	4*d*	10	Energía creciente (menos negativa)
5, 0	5*s*	2	
4, 1	4*p*	6	
3, 2	3*d*	10	
4, 0	4*s*	2	
3, 1	3*p*	6	
3, 0	3*s*	2	
2, 1	2*p*	6	
2, 0	2*s*	2	
1, 0	1*s*	2	← Energía más baja (más negativa)

TABLA 9-3 Notación expectroscoópica para l

l	0	1	2	3	4	5	6	···
Notación espectroscópica	s	p	d	f	g	h	i	···

La tercera columna de la tabla 9-2 es igual a $2(2l + 1)$. Como se mencionó en la última sección, esa cantidad es el número de combinaciones posibles de m_l y m_s, para el valor de l característico de la subcapa. Por lo tanto, la tercera columna indica el máximo número de electrones que pueden ocupar estados diferentes en la misma subcapa sin violar el principio de exclusión.

En el análisis de la última sección se encontró que la teoría de Hartree predice que la energía de la subcapa se vuelve más negativa conforme disminuye los valores de n y l. Esto puede verse inmediatamente en la tabla 9-2. La subcapa $1s$ que es la única subcapa en la capa $n = 1$ tiene la energía más baja. Las dos subcapas de la capa $n = 2$ son ambas de mayor energía y de éstas, la subcapa $2s$ tiene una energía menor que la subcapa $2p$ En la capa $n = 3$ las subcapas $3s$, $3p$, y $3d$ también se encuentran ordenadas por energía, de acuerdo con la teoría de Hartree. Sin embargo, la energía de la subcapa $4s$ en realidad es más baja que la correspondiente a la subcapa $3d$ ya que, como se explicó en la última sección, la dependencia en l de la energía E_{nl} de las subcapas puede ser más importante que la dependencia en n en capas externas con valores grandes de n. Siguiendo la lista hacia arriba puede verse que las subcapas externas siempre satisfacen la siguiente regla:

Dada una n, la subcapa externa con menor l tendrá la menor energía. Dada una l, la subcapa externa con la menor n tendrá la menor energía.

Cerca de la parte superior de la lista, la dependencia con l de E_{nl} se vuelve tan fuerte en comparación con la dependencia con n que la energía de la subcapa $7s$ es menor que la energía de la subcapa $5f$.

Debe hacerse notar que la tabla 9-2 no necesariamente proporciona el ordenamiento en energía de *todas* las subcapas en un átomo particular, sino que solo da el ordenamiento correspondiente de las subcapas que resultan ser las subcapas externas del átomo. Por ejemplo, la energía de la subcapa $4s$ es menor que la de la subcapa $3d$ en átomos de K y unos cuantos de los siguientes átomos en la tabla periódica. Sin embargo, en átomos que se encuentran más adelante en la tabla periódica, la subcapa $3d$ es de menor energía que la subcapa $4s$ ya que en estos átomos, las anteriores son subcapas internas y la dependencia en n de E_{nl} es tan fuerte, que domina la dependencia en l En la figura 9-14 se presenta información adicional de este tipo.

Ahora bien, las características de un átomo, dependen del comportamiento de sus electrones. El comportamiento de un electrón queda especificado por un conjunto de cuatro números cuánticos que determina su estado cuántico. Sin embargo, en la aproximación representada por la teoría de Hartree, sólo los números cuánticos n y l son importantes. Por lo tanto, en esta aproximación, el átomo podrá caracterizarse especificando los números cuánticos n y l de todos los electrones. Esta especificación de las subcapas ocupadas por los electrones es llamada la *configuración* del átomo. Si se conoce el ordenamiento en energía de la última subcapa llena, resulta trivial determinar la configuración de cualquier átomo en su estado base. En el estado base, los electrones deberán llenar las subcapas de modo tal que minimicen la energía total del átomo, y a la vez, sin exceder la capacidad de cada subcapa de $2(2l + 1)$. Las subcapas se irán llenando a medida que aumenta la energía, como se muestra en la tabla 9-2.

Considérese primero el átomo de H. El electrón único ocupa la subcapa $1s$ con su spin hacia "arriba" o hacia "abajo". Para el átomo de He ambos electrones se encuentran en la subcapa $1s$ uno con spin hacia "arriba" y el otro con spin hacia "abajo". La configuración de H se escribe:

$$^1\text{H}: \quad 1s^1$$

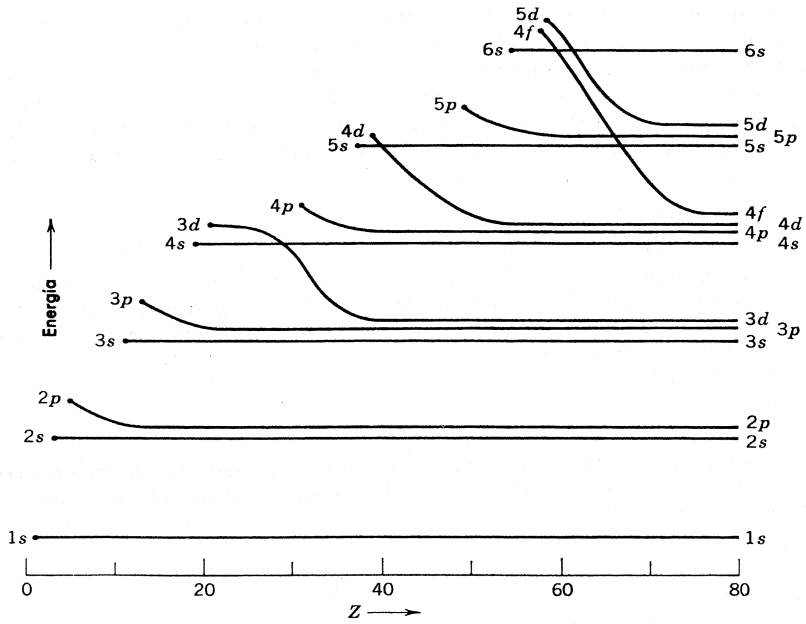


FIGURA 9-14

Representación esquemática del ordenamiento por energías de la subcapas en un átomo como función de su número atómico Z. Cada curva se inicia en la Z correspondiente a la subcapa que empieza a ocuparse. Solo se muestran subcapas ocupadas en átomos hasta el mercurio, de modo que las curvas terminan en $Z = 80$. El ordenamiento de las subcapas llenas más externas en varios átomos se encuentra a la izquierda del diagrama. El ordenamiento de las subcapas llenas del mercurio se encuentra a la derecha del diagrama. La escala de energías no es lineal y además varía con Z.

La configuración de He se escribe:

$$^{2}\text{He}: \quad 1s^2$$

El subíndice en la designación de la subcapa especifica el número de electrones que contiene; el subíndice en el símbolo químico especifica el valor de Z para el átomo. En el átomo ^{3}Li uno de los electrones debe encontrarse en la subcapa $2s$ ya que la capacidad de la subcapa $1s$ solo es de dos. La configuración de este átomo es

$$^{3}\text{Li}: \quad 1s^2 2s^1$$

El átomo ^{4}Be completa la subcapa $2s$ y tiene la configuración

$$^{4}\text{Be}: \quad 1s^2 2s^2$$

En los seis elementos del ^{5}B al ^{10}Ne los electrones adicionales llenan la subcapa $2p$. Las configuraciones del ^{5}B y ^{10}Ne son

$$^{5}\text{B}: \quad 1s^2 2s^2 2p^1$$

$$^{10}\text{Ne}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6$$

Obsérvese que la tabla periódica de los elementos presentada en la figura 9-13 se divide en una serie de bloques con cada renglón de átomos marcado con la subcapa que, de acuerdo con la tabla 9-2, están llenando los elementos de ese renglón. Sabiendo lo anterior, resulta muy fácil escribir la configuración de cualquier átomo, mediante un procedimiento que se hará evidente en el ejemplo 9-6. Sin embargo, existen ciertos átomos en los cuales se observa que sus últimos electrones se encuentran en subcapas diferentes a las que predice este esquema. Las configuraciones de estos átomos se indican en la tabla periódica en la parte inferior del símbolo químico.

Ejemplo 9-6. Escribir las configuraciones para los estados base de ^{19}K, ^{23}V, ^{24}Cr, ^{43}Tc, ^{44}Ru, ^{46}Pd, ^{57}La, ^{58}Ce, y ^{59}Pr.

Como no hay anotación debajo de ^{19}K en la tabla periódica de la figura 9-13, se puede concluír que no hay nada excepcional acerca de su configuración. Entonces, la configuración se obtiene simplemente examinando la tabla periódica y enlistando por orden las subcapas de menor energía y su población, para los 19 electrones del átomo. Esta es,

$$^{19}\text{K}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$$

Los primeros 18 electrones llenan completamente las subcapas de menor energía y el último electrón llena parcialmente la subcapa $4s$. Si se añaden cuatro electrones más, se obtiene ^{23}V y se llena completamente la subcapa $4s$ dejando 3 electrones en la subcapa $3d$ que es la que sigue en mayor energía. La configuración es:

$$^{23}\text{V}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$$

La anotación $4s^1 3d^5$ para ^{24}Cr en la figura 9-13, indica que la configuración de este átomo no termina con los símbolos $4s^2 3d^4$, como se esperaría, sino que en su lugar queda:

$$^{24}\text{Cr}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$$

Las razones para este comportamiento se explicarán más adelante. Por inspección, se demuestra que las configuraciones de los otros átomos de interés son:

$$^{43}\text{Tc}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^5$$

$$^{44}\text{Ru}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^7$$

$$^{46}\text{Pd}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10}$$

$$^{57}\text{La}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 5d^1$$

$$^{58}\text{Ce}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^2$$

$$^{59}\text{Pr}: \quad 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^3$$

◀

Del ejemplo 9-6, se puede ver que, en ciertos casos, las configuraciones observadas para los elementos no se ajustan estrictamente a las predicciones de la tabla 9-2. Por ejemplo, esta tabla establece que la energía de la subcapa $3d$ es mayor que la energía de la subcapa $4s$ cuando se están llenando estas subcapas. Sin embargo, en ^{24}Cr, y también en ^{29}Cu, uno de los electrones que podría estar en la subcapa $4s$ se encuentra realmente en la subcapa $3d$. Ocurren situaciones similares para el caso de las subcapas $5s$ y $4d$. En ^{43}Tc la subcapa $5s$ se llena de modo normal. En ^{45}Rh solo hay un electrón en la subcapa $5s$ en ^{46}Pd ambos electrones salen de la subcapa $5s$ y se pasan a la subcapa $4d$. Las configuraciones del ^{78}Pt y ^{79}Au demuestran que el mismo tipo de situación puede ocurrir también para las subcapas $6s$ y $5d$. Por estas circunstancias, debe concluirse que la separación en la energía entre las subcapas $4s$ y $3d$, $5s$ y $4d$, $6s$ y $5d$ debe ser tan pequeña mientras se están llenando que, a pesar de que en general el ordenamiento de las subcapas es como lo señala la tabla 9-2, en ciertos casos el orden puede ser invertido, como se puede ver en la figura 9-14. Otras configuraciones que no concuerdan con la tabla 9-2 se observan en el ^{57}La y en los *lantánidos* ($Z = 58$ al 71), más comúnmente llamados

tierras raras. En la tabla 9-2 se predice que después de completar la subcapa $6s$ debe llenarse la $4f$ pero para dos de las tierras raras, existe un electrón $5d$. Lo mismo sucede para un grupo de elementos que siguen a continuación del ^{89}Ac, y que son llamados *actínidos* ($Z = 90$ al 103). Utilizando el mismo argumento empleado anteriormente, estas observaciones se interpretan como que indican que la diferencia de energía entre las subcapas $5d$ y $4f$ y entre las subcapas $6d$ y $5f$ son muy pequeñas mientras que estas subcapas se llenan.

Por otro lado, ciertas predicciones de la tabla 9-2 siempre se cumplen. Como no hay excepciones para las configuraciones de los elementos en las primeras dos y últimas seis columnas de la tabla periódica, se concluye que cada subcapa p siempre es de mayor energía que las subcapas s y d precedentes, mientras se llenan estas subcapas, y en estas circunstancias, cada subcapa s será de mayor energía que la subcapa p precedente. Por lo tanto, deben existir grandes diferencias de energía entre las subcapas implicadas que se están llenando. De hecho, la diferencia de energía entre una subcapa s y la subcapa p precedente es particularmente grande, como se puede ver en la figura 9-14, y resulta fácil entender porqué. Como para una n dada la energía de la subcapa crece cuando l, crece, una subcapa s siempre es la primera en llenarse en una nueva capa. Consecuentemente, cuando se añade un electrón a una configuración de subcapa p completa, éste se coloca en la subcapa siguiente en energía, que de acuerdo con la tabla 9-2, siempre es una subcapa s y este electrón será el primero de una nueva capa. En comparación con los electrones de la subcapa precedente, la coordenada radial promedio de este electrón será considerablemente mayor, su energía potencial promedio será considerablemente menos negativa y su energía total será considerablemente mayor, mucho mayor que el aumento normal en energía total al pasar de una subcapa a la siguiente.

El hecho de que exista una diferencia de energía particularmente grande entre cada subcapa s y la subcapa p precedente, tiene algunas consecuencias importantes. Considérense los átomos de los elementos ^{10}Ne, ^{18}A, ^{36}Kr, ^{54}Xe, y ^{86}Rn, en los cuales la subcapa p está completa. Debido a la gran diferencia entre la energía de un electrón en una subcapa p y la energía que tendría si estuviera en una subcapa s el primer estado excitado de estos átomos está inusitadamente muy por encima del estado base y, consecuentemente, resulta muy difícil excitar estos átomos. En su estado base, la ley de Gauss demuestra que no existe campo eléctrico externo al átomo ya que consisten de conjuntos de subcapas llenas que conforman una distribución esféricamente simétrica de carga y ya que en general son neutros, la carga neta es cero. Además, estos átomos no producen campos magnéticos externos en su estado base, dado que, como se verá más adelante, los impulsos angulares totales de los electrones en una subcapa llena, tienen acoplamiento cero, y este acoplamiento produce un momento dipolar magnético total igual a cero. Debido a la ausencia de campos externos (al menos en base a un tiempo promedio), es muy difícil que estos átomos interaactúen con otros átomos para producir compuestos químicos. Asimismo, poseen puntos de ebullición y congelación muy bajos ya que presentan muy poca tendencia a condensarse en la forma líquida o sólida. Estos elementos son los *gases nobles*.

El átomo ^{2}He también es un gas noble, ya que su primera subcapa vacía, es una subcapa s (a pesar de que no tiene una subcapa p llena) de modo que su primer estado excitado es inusitadamente alto y porque en su estado base el átomo consiste de subcapas llenas y por lo tanto no produce campos externos. El que el ^{2}He sea un gas noble, se indica en la tabla periódica al colocarlo en la última columna en lugar de colocarlo en la segunda. Un elemento como el ^{20}Ca no es un gas noble, aunque consiste de subcapas completamente llenas, ya que en su primer estado excitado el electrón se coloca en una subcapa $3d$ de modo que el estado excitado no está muy por encima del estado base y se requiere una energía pequeña para que el átomo produzca un campo externo que le permita interactuar con otros átomos.

Otro aspecto de lo particularmente inerte que son los gases nobles, puede obtenerse graficando, para todos los elementos, los valores medidos de la energía total, en magnitud, de un electrón en la subcapa llena de mayor energía. Esto es igual a la energía necesaria para sacar al electrón del átomo, lo que se denomina *energía de ionización* del átomo. En la figura 9-15 s

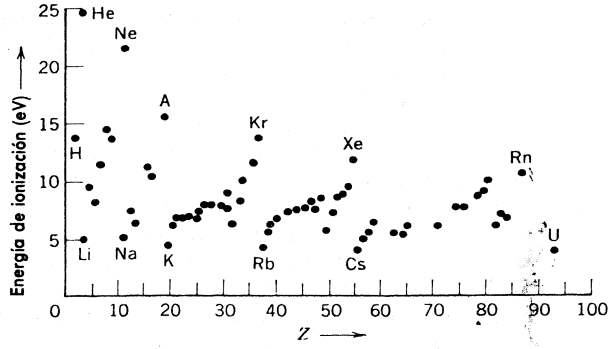


FIGURA 9-15

Energías de ionización medidas de los elementos.

muestra dicha gráfica. Puede observarse que la energía de ionización oscila en torno a un valor promedio que esencialmente es independiente de Z en concordancia con la conclusión de la sección anterior de que la energía total de los electrones en las capas más externas, es aproximadamente la misma a lo largo de toda la tabla periódica. Sin embargo, estas oscilaciones son bastante pronunciadas y es evidente que la energía total de un electrón en la subcapa llena de mayor energía de un gas noble, es considerablemente más negativa que el promedio. Estos electrones se encuentran fuertemente ligados y los átomos son difíciles de ionizar.

También puede verse que la energía de ionización es particularmente pequeña para los elementos ^{3}Li, ^{11}Na, ^{19}K, ^{37}Rb, ^{55}Cs, y ^{87}Fr. Estos son llamados *alcalinos* y contienen un electrón débilmente ligado en una subcapa s. Los elementos alcalinos son químicamente muy activos ya que energéticamente resulta favorable que pierdan el electrón débilmente ligado y adopten la configuración más estable que se obtiene con subcapas completamente llenas. Estos elementos tienen valencia más uno.

En el otro extremo, se encuentran los *halógenos* ^{9}F, ^{17}Cl, ^{35}Br, ^{53}I, y ^{85}At, los cuales tienen un electrón menos que los requeridos para llenar la subcapa p. Estos elementos presentan una alta *afinidad electrónica,* es decir, una especial inclinación por capturar un electrón. Tienen una valencia menos uno. En 1962 se descubrió que bajo circunstancias especiales, los gases nobles podrían combinarse con el halógeno ^{9}F para formar moléculas estables. Antes de esa fecha se creía que los gases nobles eran completamente inertes. Estas moléculas pueden formarse sólo porque el halógeno ^{9}F tiene una afinidad electrónica tan alta, que puede extraer uno de los electrones fuertemente ligados de las subcapas llenas más externas de los gases nobles.

En los primeros tres renglones de la tabla periódica, las propiedades de los elementos, tales como valencia y energía de ionización, cambian uniformemente desde el elemento alcalino con el que empieza el renglón, hasta el gas noble con el que termina. En el cuarto renglón de la tabla periódica esta situación no es siempre cierta. Los elementos del ^{21}Sc hasta ^{28}Ni, llamados primer *grupo de transición*, presentan propiedades químicas muy similares y casi las mismas energías de ionización. Estos elementos ocurren al llenarse la subcapa $3d$. El radio de esta subcapa es considerablemente menor que el de la subcapa $4s$ que se encuentra totalmente llena para todos los elementos del primer grupo de transición excepto el ^{24}Cr. La subcapa llena $4s$ tiende a apantallar los electrones $3d$ de influencias externas, y por lo tanto las propiedades químicas de estos elementos son bastante similares, independientemente de qué tantos electrones $3d$ contengan. El punto es que las propiedades químicas de los elementos dependen de los electrones en las capas más *externas* de sus átomos, ya que estos electrones son los

causantes de los campos eléctricos y magnéticos que interactúan con los electrones de otros átomos. Las propiedades químicas del ^{29}Cu son bastante diferentes que las del primer grupo de transición ya que solo tiene un electrón $4s$ en la subcapa llena más externa. En menor grado, esto también es cierto para el ^{24}Cr. El elemento ^{30}Zn consiste de un conjunto de subcapas completamente llenas y por lo tanto es un tanto más inerte, como puede verse de su energía de ionización. Grupos de transición similares ocurren cuando se llenan las subcapas $4d$ y $5d$.

Un ejemplo extremo de la misma situación es el caso de las tierras raras, del ^{58}Ce al ^{71}Lu. Estos son los elementos para los cuales la subcapa $4f$ se llena. Esta subcapa queda profundamente dentro de la subcapa $6s$ que está completamente llena en todas las tierras raras. Los electrones $4f$ también quedan protegidos del ambiente externo, que las propiedades químicas de estos elementos son casi idénticas. Lo mismo sucede en los actínidos del ^{90}Th hasta ^{103}Lw. En este grupo, la subcapa $5f$ se llena dentro de la subcapa $7s$. Uno de los campos de trabajo más interesantes, en la química contemporánea, consiste en el estudio de los actínidos de mayor número atómico, los cuales fueron descubiertos hasta fechas muy recientes.

Para concluir este análisis, resulta apropiado hacer énfasis en el *principio de exclusión*. Si este principio no fuera obedecido, todos los electrones en un átomo multielectrónico estarían en la subcapa $1s$ ya que esta es la subcapa de menor energía. Si este fuera el caso, todos los átomos tendrían distribuciones de carga esféricamente simétricas, de radio tan pequeño que no producirían campos eléctricos externos y, además, tendrían sus primeros estados excitados muy altos. Entonces, *todos* los átomos serían muy parecidos a gases nobles y, por lo tanto, no habría moléculas. De hecho, todo el universo sería completamente diferente si los electrones no estuvieran sujetos al principio de exclusión.

Ejemplo 9-7. Estimar, en orden de magnitud, la energía de ionización del ^{92}U, suponiendo que el principio de exclusión no es operante, de modo que todos sus electrones se encuentran en la capa $n = 1$. Con este fin, puede suponerse que un electrón típico experimenta la carga nuclear apantallada por la carga debido a la mitad de los otros electrones en la capa. Comparar el resultado de esta estimación con el valor real de la energía de ionización que se muestra en la figura 9-15.

A partir de la fórmula para la energía de un átomo con un solo electrón, se puede obtener una estimación de la energía total de un electrón típico.

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \times 13.6\ \text{eV}$$

Haciendo $n = 1$ y utilizando una Z efectiva con el valor $Z_1 = Z/2 = 92/2 = 46$, el valor absoluto del resultado es la energía de ionización. Así, se obtiene

$$|E| = (46)^2 \times 13.6\ \text{eV} \simeq 3 \times 10^4\ \text{eV}$$

De la figura 9-15, se encuentra que la energía de ionización real es

$$|E| = 4\ \text{eV}$$

Sin el principio de exclusión, la energía de ionización del ^{92}U sería cuatro órdenes de magnitud mayor de lo que es en realidad. ◀

9.8 Espectros de líneas de rayos-X

En un tubo de rayos-X, como el que se muestra en la figura 2-9, de un cátodo caliente se emiten electrones que son acelerados, formando un haz con energías cinéticas del orden de 10^4 eV por medio de un voltaje aplicado entre el cátodo y el ánodo, para después incidir en el ánodo. Al pasar por los átomos del ánodo, un electrón del haz ocasionalmente pasará cerca de un electrón

en una subcapa *interna*. Debido a la interacción de Coulomb entre el electrón energético del haz y el electrón atómico, este último podrá recibir suficiente energía como para salir de su muy negativo nivel de energía y escapar del átomo. Esto deja al átomo en un estado altamente excitado ya que está faltando un electrón que tenía una alta energía negativa. Eventualmente, el átomo regresará a su estado base, emitiendo un conjunto de fotones de alta frecuencia, que corresponderá a su *espectro de líneas de rayos-X*. (La interacción entre el haz de electrones y un electrón atómico de una subcapa externa que conduce a estados excitados de baja energía y la producción del espectro óptico, será estudiada en el capítulo siguiente). El espectro total de radiación-x emitido por un tubo de rayos-X consiste de un espectro de líneas discretas, superpuesto a un continuo, como se ilustra en la figura 9-16 para un caso típico. El continuo se debe a los procesos bremsstrahlung que ocurren cuando el haz de electrones sufre aceleraciones al ser dispersado por los núcleos de los átomos en el ánodo. Como se vio en la sección 2-6, la forma del continuo debido al bremsstrahlung depende principalmente de la energía del haz de electrones. Sin embargo, la forma del espectro de líneas de rayos-x es característica del tipo particular de átomos que constituyen el ánodo.

Los espectros de líneas de rayos-x son de interés práctico, ya que constituyen una característica significativa de los rayos-x que tienen tantas aplicaciones útiles en la ciencia y la tecnología. Estos espectros también son de interés teórico ya que proveen información acerca de las energías de los electrones en las subcapas internas de los átomos. Se verá que esta información concuerda bastante bien con las predicciones de la teoría de Hartree.

Como ejemplo de como se produce un espectro de líneas de rayos-X, supóngase que inicialmente se extrae un electrón de la subcapa $1s$ de un átomo en el ánodo del tubo. En el primer paso del proceso de desexcitación, un electrón de una de las subcapas de energía menos negativa, cae en el agujero que queda en la subcapa $1s$ un electrón $2p$ por ejemplo, podría caer en el agujero. Esto dejaría un agujero en la subcapa $2p$ pero la energía de excitación del átomo se reduciría considerablemente. La energía se conserva por la emisión de un fotón cuya energía será igual a la disminución de la energía de excitación del átomo; es decir, la diferencia entre las energías asociadas con un electrón en la subcapa $1s$ y otro en la $2p$ Típicamente habría otros pasos en el proceso de desexcitación. Por ejemplo, el agujero en la subcapa $2p$ podría ser llenado por un electrón $3d$ dejando un agujero en la subcapa $3d$ que a su vez se llena con

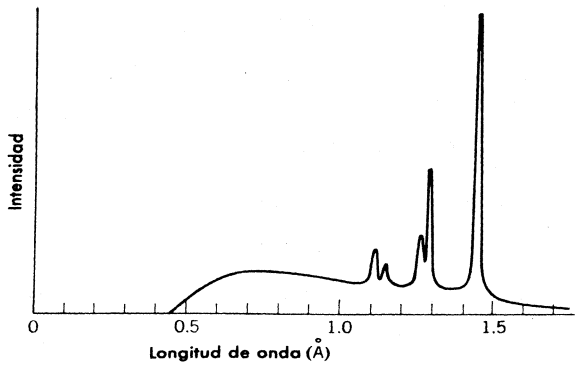


FIGURA 9-16

Espectro de rayos-x típico. Las líneas son características de los átomos del ánodo (tungsteno en el caso ilustrado) del tubo de rayos-x. El continuo aparece debido al bremsstrahlung de los electrones acelerados al dispersarse de los núcleos de estos átomos.

electrón $4p$ etc. El efecto neto de cada paso, es que el *agujero* va saltando a niveles de energía menos negativa. Cuando el agujero logra llegar hasta la subcapa de energía menos negativa, que generalmente es la subcapa más externa, se llena con el electrón emitido originalmente del nivel $1s$ o más típicamente, con algún otro electrón del ánodo. Una vez más, el átomo queda neutral y en su estado base.

Los niveles de energía de un átomo, implicados en la emisión del espectro de líneas de rayos-X pueden representarse más convenientemente mediante un diagrama de niveles de energía un tanto diferente de los que se han presentado anteriormente. En la figura 9-17 se muestra uno de esos diagramas para el átomo ^{92}U que incluye todos los niveles de energía de rayos-x hasta $n = 4$. Dado el intervalo tan amplio de energías involucradas, convencionalmente se utiliza una escala logarítmica de energías. Para simplificar el estudio, convencionalmente se define la energía total del átomo igual a cero, cuando el átomo se encuentra en su estado base. Como la escala de energías es logarítmica, el cero de energía que representa el estado base, no se ha incluído en el diagrama, sin embargo, esta omisión no tiene importancia. La diferencia más importante entre un diagrama de niveles de energía de rayos-x y un diagrama de niveles de energía estandar es que el diagrama de rayos-x proporciona la energía del átomo cuando no hay un electrón indicado con los números cuánticos n, l, y j . Es decir, el diagrama describe los niveles de energía del *agujero,* con números cuánticos n, l, j, que va saltando de una subcapa a otra en tanto que el átomo emite su espectro de rayos-x. Como el agujero representa la carencia de un electrón con energía negativa, la energía asociada con un agujero es positiva. Así pues, las energías de todos los niveles en un diagrama de rayos-x, son positivas.

Los niveles de energía en la figura 9-17, también se identifican por una notación muy comúnmente usada en el estudio de espectros de rayos-x. De acuerdo con esta notación, el número cuántico n se especifica por una letra mayúscula de acuerdo con el esquema de la tabla 9-4. Es decir, un nivel $n = 1$ es llamado nivel K un nivel $n = 2$ es llamado nivel L etc. Similarmente, la capa $n = 1$ es llamada capa K etc. Los números romanos que aparecen como subíndices, indican los niveles de igual n, en orden decreciente de energía. Es decir, los tres niveles L son denotados L_{I}, L_{II}, y L_{III} en orden decreciente de energía.

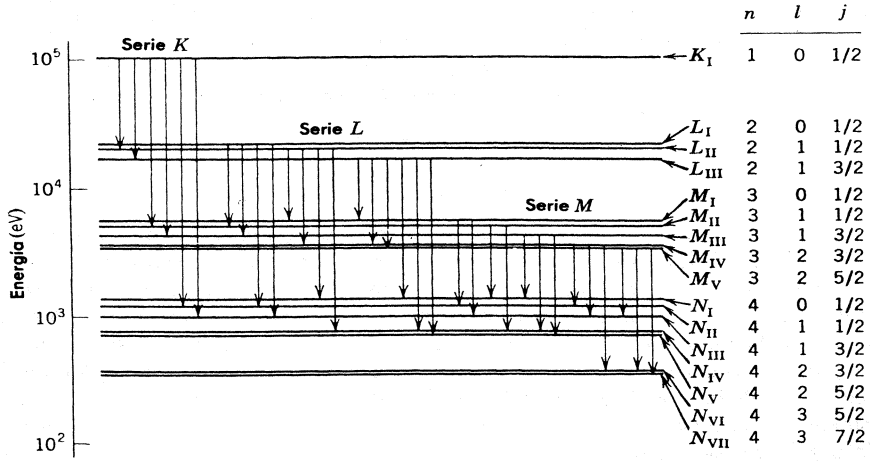


FIGURA 9-17

Niveles de alta energía de rayos-x para el átomo de uranio y transiciones que entre estos niveles permiten las reglas de selección.

TABLA 9-4 Notación espectroscópica para n

n	1	2	3	4	5	...
Notación espectroscópica	K	L	M	N	O	...

Si la energía de un átomo con un electrón de números cuánticos n, l, j es particularmente negativa, la energía de un átomo con un agujero de iguales números cuánticos es particularmente positiva, ya que se requiere proveer más energía al átomo, para extraerle un electrón. En otras palabras, la carencia de una energía negativa grande es equivalente a la presencia de una energía positiva grande. Si se mantiene esta inversión en mente, de la figura 9-17, que se obtuvo de un análisis del espectro experimental de rayos-x del ^{92}U, se puede observar que las dependencias de n, l, j de los niveles de energía de rayos-x, son como se esperaría de acuerdo con la teoría de Hartree. Las energías de estos niveles aumentan conforme disminuyen n y l, de acuerdo con la inversión de la regla, definida en la sección anterior y que describe las predicciones teóricas. El nivel de energía de rayos-x correspondiente a $j = l + 1/2$ es de menor energía y el correspondiente a $j = l - 1/2$, tiene mayor energía. Esta es la inversión esperada en el desdoblamiento de los niveles de energía, de acuerdo con j, como se analizó anteriormente en la sección 8-6 en relación con átomos monoelectrónicos. En la capa L $(n = 2)$ del ^{92}U este desdoblamiento es mayor de 2000eV, más grande que la dependencia en l por lo tanto, resulta poco apropiado llamarle "desdoblamiento de estructura fina" a la dependencia en j de los niveles de energía de rayos-x. Esta fuerte dependencia con j característica de las capas internas de todos los átomos excepto para aquellos de Z pequeña, se debe parcialmente al aumento de la magnitud de la interacción spin-órbita debido al valor grande del término $\overline{(1/r)dV(r)/dr}$ en (18-35). También implica otros efectos relativistas que se vuelven muy grandes para los electrones de alta velocidad que pueblan las capas internas de estos átomos.

Como ya se indicó, resulta conveniente pensar que la producción de espectros de líneas de rayos-X se debe a la creación de un agujero en uno de los niveles de alta energía y a los saltos subsecuentes del agujero por los niveles de menor energía. Con cada salto, se emite un fotón de rayos-X que se lleva el exceso de energía. Existe la relación usual entre la frecuencia ν del fotón y su energía E a saber, $E = h\nu$. Sin embargo, no todas las transiciones ocurren. Existe un conjunto de *reglas de selección* para el cambio en números cuánticos del agujero, que son:

$$\Delta l = \pm 1 \tag{9-28}$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \tag{9-29}$$

Estas reglas de selección son iguales a las correspondientes a un electrón en un átomo monoelectrónico, (8-37) y (8-38) y se explican de igual forma a la presentada en la sección 8-7. En el diagrama de niveles de rayos-X para el ^{92}U, en la figura 9-17, se muestran las transiciones que obedecen estas reglas de selección. El conjunto completo de rayos-X emitidos por dichas transiciones (además de algunos que rara vez se observan cuya emisión corresponde a violaciones de las reglas de selección) constituyen el espectro de líneas de rayos-X de un átomo. Todas las transiciones desde la capa K producen líneas de la llamada *serie K*, en donde K_α corresponde a una transición a la capa L K_β a la capa M etc. Las transiciones de la capa L producen líneas de la *serie L* y así sucesivamente.

Ejemplo 9-8. Estimar el voltaje de aceleración mínimo necesario para que un tubo de rayos-X con un ánodo de ^{26}Fe emita una línea K_α de su espectro. Asimismo, estimar la longitud de onda de un fotón K_α

Para estimar la energía de excitación de un átomo de ^{26}Fe con un agujero en la capa K puede utilizarse la descripción burda de los resultados de la teoría de Hartree. Por la ecuación (9-27), su energía es:

$$E_K \simeq + \frac{\mu Z_n^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \simeq 13.6 \frac{Z_n^2}{n^2} \text{ eV}$$

$$\simeq 13.6(Z - 2)^2 \text{ eV} = 13.6 \times (24)^2 \text{ eV}$$

$$\simeq +7.8 \times 10^3 \text{ eV}$$

en donde se han tomado $n = 1$ y $Z_n = Z_1 = Z - 2$. Un electrón del haz que bombardea un átomo en el ánodo deberá tener una energía semejante para producir el agujero. El voltaje necesario para acelerar el electrón del haz a esta energía, resulta

$$V \simeq 7.8 \times 10^3 \text{ V}$$

Cuando el átomo emite un fotón K_α el agujero queda en la capa L y su energía es:

$$E_L \simeq +13.6 \frac{Z_n^2}{n^2} \text{ eV} \simeq 13.6 \frac{(26 - 10)^2}{4} \text{ eV} \simeq +8.7 \times 10^2 \text{ eV}$$

en donde se ha tomado $n = 2$ y siguiendo los resultados del ejemplo 9-5, se toma $Z_n = Z_2 = Z - 10$. La energía que se lleva el fotón es:

$$h\nu = E_K - E_L$$

Sin embargo, como el valor de E_L es solo aproximadamente al 10% del valor de E_K, y como la aproximación burda que se ha utilizado para obtener E_K generalmente no tiene una precisión menor al 10%, daría lo mismo tomar

$$h\nu \simeq E_K$$

La longitud de onda λ del fotón se relaciona con su frecuencia y su velocidad c por medio de la expresión

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{h\nu}{hc}$$

de modo que

$$\frac{1}{\lambda} \simeq \frac{E_K}{hc} \simeq \frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 4\pi c\hbar^3} (Z - 2)^2$$

El término que multiplica a $(Z - 2)^2$ es la constante de Rydberg, R_M, definida en (4-22). Por lo tanto

$$\frac{1}{\lambda} \simeq R_M(Z - 2)^2 \simeq 1.1 \times 10^7 \times (24)^2 \text{ m}^{-1} = 6.3 \times 10^9 \text{ m}^{-1} \qquad (9\text{-}30)$$

y

$$\lambda \simeq 1.6 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.6 \text{ Å}$$

Esta longitud de onda es aproximadamente del tamaño de una molécula típica, o del espaciamiento entre átomos o moléculas en un cristal. Así pues, los rayos-X K_α del ^{26}Fe pueden ser utilizados en experimentos de difracción para estudiar la estructura de moléculas o cristales. ◀

Una característica notable de los espectros de rayos-X, es que tanto las longitudes de onda como las frecuencias de las líneas varían suavemente de elemento a elemento. No existen los

cambios bruscos que se observan en los espectros atómicos en el intervalo óptico de frecuencias. La razón se debe a que las características de los espectros de rayos-X dependen de las energías de enlace de los electrones en las capas más internas. A medida que aumenta el número atómico Z estas energías de enlace simplemente aumentan uniformemente, debido a la mayor carga nuclear y no son afectadas por los cambios periódicos en el número de electrones en las capas más externas de los átomos que si afectan los espectros ópticos. Moseley fué el primero en observar la regularidad de los espectros de los rayos-X. En 1913, realizó una revisión de los espectros de rayos-X y obtuvo datos sobre las líneas K_α de un buen número de elementos. (En realidad, como se puede ver en la figura 9-17, existen dos líneas K_α muy cercanas una de la otra, pero era difícil para Moseley resolver esa estructura). Las longitudes de onda medidas, podían ser ajustadas, dentro de la precisión experimental, por la fórmula empírica:

$$\frac{1}{\lambda} \simeq C(Z - a)^2 \tag{9-31}$$

donde C es una constante con un valor aproximadamente igual a la constante de Rydberg R_M, y a es una cuyo valor es 1 o 2. Esta fórmula y algunos de los resultados se muestran graficados en la figura 9-18.

Moseley interpretó la fórmula empírica en base al modelo de Bohr, que había sido propuesto un poco antes de que efectuara sus medidas. Realizó un cálculo esencialmente igual al presentado en el ejemplo 9-8, para obtener (9-30), que concuerda bastante bien con (9-31), pero tomó la ecuación básica de la energía, (9-27), del modelo de Bohr, en lugar de la teoría de Hartree. Es decir, adaptó la ecuación de Bohr para la energía en (9-27), sustituyendo Z por Z_n, como forma de describir el apantallamiento de la carga nuclear por cargas electrónicas en un átomo multielectrónico. Sus argumentos respecto al apantallamiento fueron similares a los que se presentaron en la sección 9-6, excepto que él pensaba que los electrones se encontraban en órbitas de Bohr bien definidas y concluyó que $Z_1 \simeq Z - 1$ en lugar de $Z_1 \simeq Z - 2$.

El trabajo de Moseley, realizado cuando era estudiante de postgrado, fué un paso muy importante en el desarrollo de la física cuántica. La aplicación simple y con buen éxito del modelo de Bohr a los espectros de rayos-X, constituyó una de sus primeras confirmaciones. Utilizando la fórmula empírica para determinar Z estableció sin ambigüedad la correlación entre la carga nuclear de un átomo y su ordenamiento en la tabla periódica de los elementos. Encontró por ejemplo, que el número atómico del ^{27}Co es uno menos que el ^{28}Ni, a pesar, de que su peso atómico es mayor. También demostró que existían huecos en la tabla periódica como se conocían en ese tiempo, en $Z = 43$, 61, 72, y 75. Posteriormente se descubrieron los elementos correspondientes a esos números atómicos. Las contribuciones de Moseley se vieron interrumpidas por su servicio militar en la primera guerra mundial, de la cual no regresó.

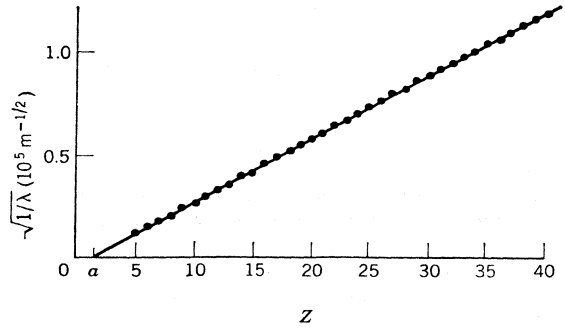


FIGURA 9-18

Puntos que representan los datos de Moseley y una curva que representa su fórmula empírica. La curva es una línea recta ya que la raíz cuadrada del recíproco de las longitudes de onda de las líneas de rayos-x se grafican en función del número atómico de los átomos que producen dichas líneas.

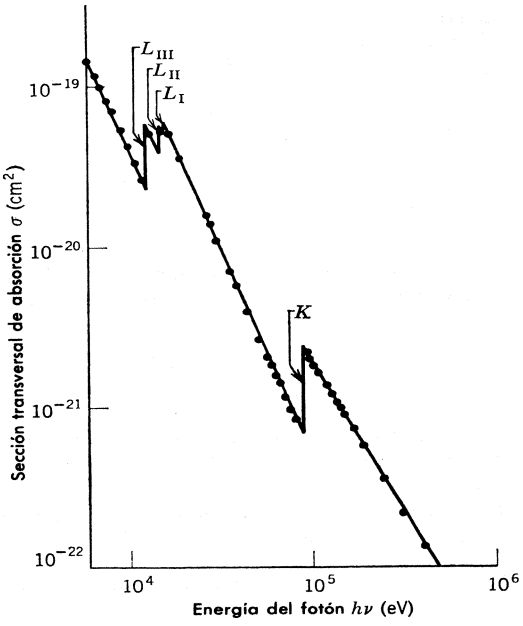


FIGURA 9-19

Probabilidad de que un átomo de plomo absorba un fotón de rayos-x por efecto fotoeléctrico, como función de la energía del fotón. La probabilidad se expresa en términos de la sección transversal de absorción.

Ejemplo 9-9. En la figura 9-19 se presentan valores medidos, por efecto fotoeléctrico, de la probabilidad de que un átomo de ^{82}Pb absorba un fotón de rayos-X, de un haz de fotones; se grafica la sección transversal de absorción como función de la energía $h\nu$ del fotón. La discontinuidad prominente por debajo de 10^5 eV es llamada *umbral de absorción K*. Demostrar que ocurre para una energía tal, que el fotón incidente apenas puede producir un agujero en la capa K del ^{82}Pb. Después, explique el origen de las discontinuidades ligeramente superiores a 10^4 eV.

De acuerdo con (9-27), la energía necesaria para producir un agujero en la capa K del ^{82}Pb es aproximadamente:

$$E_K \simeq +13.6\frac{Z_n^2}{n^2}\text{ eV} \simeq 13.6(Z-2)^2\text{ eV} = 13.6 \times (80)^2\text{ eV} = 8.7 \times 10^4\text{ eV}$$

Lo anterior concuerda con la energía medida del *umbral de absorción K*, dentro de un porcentaje muy bajo. Un fotón con energía ligeramente superior a este umbral podrá ser absorbido por el efecto fotoeléctrico por cualquier electrón del átomo. Sin embargo, un fotón cuya energía esté por debajo de este umbral no posee la energía necesaria para extraer un electrón de la capa K en este caso, el efecto fotoeléctrico no podrá ocurrir en un electrón de capa K. Por lo tanto, la sección transversal de absorción para el efecto fotoeléctrico, disminuye bruscamente en el umbral de absorción K

A energías un poco por encima de 10^4 eV existen tres umbrales de absorción L que ocurren a las energías necesarias para producir agujeros en la capa L del átomo. Son tres porque la "estructura fina", debida a efectos spin-órbita y otros relativistas, divide el nivel L entre niveles L_I, L_{II}, L_{III}, como puede verse en la figura 9-17. ◀

PREGUNTAS

1. ¿Por qué existe dificultad en distinguir entre sí a los dos electrones en un átomo de helio, pero no a los dos electrones en átomos de hidrógeno separados? ¿Qué sucede en una molécula diatómica de hidrógeno?

2. Explicar, sin hacer referencia a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, por qué la forma de producto de la eigenfunción de (9-3) implica inmediatamente que las dos partículas que describe, se mueven independientemente.

3. ¿Puede *usted* escribir una ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para dos partículas idénticas sin utilizar marcas para las partículas?

4. ¿Las marcas de las partículas son objetables intrínsecamente cuando se trabaja con sistemas mecánico-cuánticos de partículas idénticas? Si no, explicar con precisión que precauciones se deben tomar al utilizarlas.

5. Como el valor de las eigenfunciones totales antisimétricas cambia cuando se intercambian las marcas de las partículas, ¿por qué esas eigenfunciones pueden ser utilizadas para describir con precisión un sistema de electrones?

6. En un átomo con dos electrones, ¿la degeneración por intercambio puede aumentar el número de estados degenerados? Explique.

7. Piensa usted que el signo de la carga de una partícula elemental, como un electrón o un protón, es una propiedad más o menos fundamental que el "signo" de su simetría?

8. ¿Cómo se afectan más los átomos, si se invierten los signos de las cargas de todos sus constituyentes o si se invierten todas sus simetrías?

9. Exactamente, ¿Qué quiere decir la afirmación de que la variable de spin no es continua?

10. ¿Sería posible medir los efectos de la fuerza de intercambio entre dos electrones, si no existieran las interacciones de Coulomb entre éllos que producen una energía de interacción cuya magnitud depende del signo de la fuerza de intercambio?

11. ¿Por qué sería más difícil resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un sistema de partículas con interacción que para un sistema de partículas que se mueven independientemente?

12. Describir los pasos en el ciclo del tratamiento autoconsistente de Hartree de un átomo multielectrónico. ¿Por qué la estimación del potencial neto $V(r)$ que se obtiene al final de un ciclo es más precisa que la estimación que se hace al principio?

13. ¿Por qué la dependencia angular de las eigenfunciones de átomos multielectrónicos es igual que en las eigenfunciones de átomos con un solo electrón? ¿Por qué es diferente la dependencia radial, excepto cerca del origen donde es igual?

14. ¿Cuál es la justificación para utilizar las ecuaciones del átomo con un electrón con una Z efectiva, para estudiar átomos multielectrónicos?

15. ¿Cuáles son las consecuencias del hecho de que todos los átomos son aproximadamente del mismo tamaño? ¿Cuáles son las razones que explican este hecho?

16. Diseñar un sistema puramente mecánico en el cual una partícula clásica presentaría la tendencia de evitar el punto sobre el cual gira, como se muestra en la figura 9-12.

17. Explicar todos los aspectos de la dependencia con Z de las energías de las subcapas que se grafican en la figura 9-14.

18. ¿Por qué es particularmente difícil separar mezclas de tierras raras por técnicas químicas?

19. ¿Cómo se podría asegurar que si no hubiera moléculas no habría vida?

20. ¿Qué propiedad de los rayos-X los hace tan útiles en la observación de estructuras internas que de otro modo serían invisibles?

21. Dar un ejemplo del mundo clásico donde el concepto de agujero pueda utilizarse de modo comparable al utilizado en el estudio de espectros de líneas de rayos-X.

22. ¿Qué argumento podría haber utilizado Moseley para concluir que la Z efectiva de una capa K es $Z_1 \simeq Z - 1$? ¿Puede aplicarse la ley de Gauss de electrostática para calcular el apantallamiento producido por electrones que se mueven en órbitas de Bohr?

23. ¿Qué características de la tabla periódica de la figura 9-13 no fueron reconocidas por Mendeleev?

24. ¿Se obtiene alguna explicación de por qué el elemento de mayor número atómico que se encuentra en la naturaleza es el ^{92}U? a partir de las propiedades de átomos multielectrónicos?

25. En su opinión, ¿Cuál es la consecuencia más importante del principio de exclusión?

PROBLEMAS

1. Siguiendo el procedimiento indicado en el texto, desarrollar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para dos partículas idénticas sin interacción de una caja, (9-1).

2. Aplicando la técnica de separación de variables, demostrar que para un potencial aditivo de la forma de (9-2), existen soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para dos partículas, en forma de producto como (9-3).

3. En las dos funciones de densidad de probabilidad, que se obtienen de las eigenfunciones simétrica y antisimétrica (9-8) y (9-9) intercambiar las marcas de las partículas y demostrar que ninguna de las dos se ve afectada por el intercambio.

4. Verificar que la extensión de la eigenfunción para tres partículas del ejemplo 9-2 es antisimétrica con respecto a un intercambio de marcas de dos de las partículas.

5. Verificar que la extensión de la eigenfunción de tres partículas del ejemplo 9-2 es idénticamente igual a cero si dos partículas se encuentran en el mismo estado espacial y de spin.

6. Verificar que el factor de normalización $1/\sqrt{3!}$ citado en el ejemplo 9-2, es correcto.

7. Verificar que la extensión de la eigenfunción de tres partículas del ejemplo 9-3, es simétrica respecto a un intercambio de marcas de dos partículas.

8. Una partícula α contiene dos protones o dos neutrones. Demostrar que si cada uno de sus constituyentes es antisimétrico, entonces, como se afirmó en la tabla 9-1, debe ser simétrica. (Sugerencia: considerar un par de partículas α y el efecto de intercambiar marcas de todos los constituyentes de una con todos los constituyentes de la otra).

9. Escribir una expresión para el valor esperado de la energía asociada con la interacción de Coulomb entre los dos electrones de un átomo de helio en su estado base. Utilizar una eigenfunción espacial para el sistema compuesto de los productos de eigenfunciones tipo átomo con un electrón, cada una de las cuales describe un electrón que se mueve independientemente en torno a un núcleo con $Z = 2$. En lugar de tratar de resolver la integral del valor esperado, comentar su relación con los niveles de energía que se muestran en la figura 9-7.

10. Probar que cualesquiera dos eigenfunciones ligadas no degeneradas y diferentes $\psi_i(x)$ y $\psi_j(x)$ que son soluciones de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para el mismo potencial $V(x)$ obedecen la relación de *ortogonalidad*.

$$\int_{\infty}^{\infty} \psi_j^*(x)\psi_i(x)\,dx = 0 \qquad i \neq j$$

(Sugerencia: (i) escribir las ecuaciones de las cuales ψ_i y ψ_j son soluciones y después tomar el complejo conjugado de la segunda para obtener la ecuación satisfecha por ψ_j^*). (ii) Multiplicar l

ecuación en ψ_i por ψ_j^* la ecuación en ψ_j^* por ψ_i, y restar. (iii) Integrar utilizando una relación de la forma $\psi_j^* d^2\psi_i/dx^2 - \psi_i d^2\psi_j^*/dx^2 = (d/dx)(\psi_j^* d\psi_i/dx - \psi_i d\psi_j^*/dx)$.) Esta prueba puede ser extendida para incluír eigenfunciones degeneradas y también eigenfunciones no ligadas que estén adecuadamente normalizadas. ¿Puede ver como hacerlo?

11. (a) Siguiendo el procedimiento señalado en la sección 9-5, desarrollar la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para un sistema de Z electrones en un átomo, que se mueve independientemente en un conjunto de potenciales netos idénticos $V(r)$. (b) Después, separar en un conjunto de Z idénticas ecuaciones de Schrodinger independientes del tiempo, una para cada electrón. (c) Verificar que la forma de una ecuación típica, es como se afirma en (9-22). (d) Comparar esta forma con la de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un átomo con un solo electrón, (7-12).

12. (a) Demostrar que para un sistema de N electrones independientes, el número de términos en la combinación lineal de la eigenfunción antisimétrica total que describe dicho sistema es $N!$ (Sugerencia: considerar el ejemplo 9-2 y utilizar la técnica matemática de inducción). (b) Evaluar el número de dichos términos para el átomo de argón con $Z = 18$. (Sugerencia: utilizar tablas matemáticas para evaluar $N!$, utilizar la fórmula de Stirling, que se encuentra en la mayoría de las referencias matemáticas, para obtener una aproximación). (c) Discutir brevemente la conexión entre los resultados de (b) y el procedimiento utilizado por Hartree para tratar el átomo de argón.

13. (a) Utilice la información de la figura 9-11 para hacer un bosquejo, en papel semilogarítmico, del potencial neto $V(r)$ para el átomo de argón. Asegurarse de determinar varios valores de r/a_0 entre 0 y 0.25, ya que esta información será utilizada en el problema 17. (b) Asimismo, muestre los niveles de energía E_1 y E_2, utilizando las estimaciones del ejemplo 9-5, y el nivel de energía E_3, utilizando las medidas experimentales de la figura 9-15.

14. Encontrar el valor de Z_1 para el átomo de helio, el cual, al utilizarse en las ecuaciones (9-27) conduce a una concordancia con la energía del estado base que se muestra en la figura 9-6. (b) Comparar Z_1 y Z. (c) ¿Tiene Z_1 algún sentido en un átomo con tan pocos electrones como el helio? Explicar brevemente.

15. (a) Utilizar la Z_n para el átomo de argón que se obtuvo en el ejemplo 9-5, en la ecuación para el átomo con un electrón en que se determina el valor esperado de la coordenada radial, para estimar los radios de las capas atómicas correspondientes a $n = 1$, 2 y 3. (b) Comparar los resultados con la figura 9-10.

16. Desarrolle un argumento matemático para la tendencia, ilustrada en la figura 9-12, de un electrón atómico con impulso angular L de evitar el punto respecto al cual gira. Tratar al electrón en forma semiclásica suponiendo que gira en una órbita en un plano fijo que pasa por el núcleo. (a) Demostrar que su energía total puede escribirse

$$E = \frac{p_{\|}^2}{2m} + \left[V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}\right] = \frac{p_{\|}^2}{2m} + V'(r)$$

donde $p_{\|}$ es su componente de impulso lineal paralela a la coordenada vectorial radial de longitud r. (b) Explicar porqué lo anterior indica que su movimiento radial es como si estuviera en un sistema unidimensional con potencial $V'(r)$. (c) Después, demostrar que $V'(r)$ se vuelve repulsivo para r pequeña debido al comportamiento dominante del término $L^2/2mr^2$, a veces llamado *potencial centrífugo*.

17. Dibujar el potencial $V'(r)$ para el átomo de argón con $l = 0$ y $l = 1$, definido en el problema 16, sumando los potenciales centrífugos correspondientes a la $V(r)$ que se obtuvo en el problema 13. (b) Dibujar también el nivel de energía E_2. (c) Mostrar los límites clásicos del movimiento, entre los cuales $E_2 \geq V'(r)$. (d) Comparar estos límites con las densidades de probabilidad radial de la figura 9-10, para $n = 2$, $l = 0$, y $n = 2$, $l = 1$.

18. Escribir las configuraciones para los estados base de ^{28}Ni, ^{29}Cu, ^{30}Zn, y ^{31}Ga.

19. Escribir las configuraciones para los estados base de todos los lantánidos, haciendo el mayor uso posible de marcas de ditto.

20. Investigaciones recientes en física nuclear han conducido a la predicción de que núcleos con número atómico $Z = 110$ serían lo suficientemente estables para permitir que algo del elemento $Z = 110$ haya sobrevivido desde la época en que se crearon los elementos. (a) Predecir una configuración probable para dicho elemento. (b) Predecir las propiedades químicas del elemento. (c) ¿Dónde sería un lugar apropiado para empezar a buscarlo?

21. De la información contenida en las figuras 9-6 y 9-15, determinar la energía necesaria para extraer un electrón de un átomo de helio singularmente ionizado en su estado base. (b) Comparar esta energía con la predicha por la mecánica cuántica de átomos con un electrón.

22. (a) Hacer una representación esquemática de un diagrama estándar de niveles de energía para el átomo ^{22}Ti mostrando los resultados poblados por electrones en el caso en que falte un electrón de la capa K El diagrama debe ser comparable al de la figura 9-9, en el sentido de que no se intenta dar la energía de los niveles en una escala exacta sin distinguir entre los niveles L_{I}, L_{II}, y L_{III} etc. (b) Hacer lo mismo para el caso en que falte un electrón en la capa L (c) Dibuje una representación esquemática de un diagrama de niveles de energía de rayos-X que muestre las energías del átomo cuando se produce un agujero en las capas K o L (d) Compare la utilidad de los diagramas de niveles de energía estándar y de rayos-X para casos en que el agujero se encuentre en una capa interna. (e) Hacer el mismo tipo de comparación para el caso en que el agujero se encuentre en una capa externa.

23. Las longitudes de onda de la serie K del ^{74}W son (ignorando la estructura fina): para K_α, $\lambda = 0.210$ Å; para la K_β, $\lambda = 0.184$ Å; para la K_γ, $\lambda = 0.179$ Å. La longitud de onda correspondiente al umbral de absorción K es $\lambda = 0.178$ Å. Utilizar esta información para construir un diagrama de niveles de energías para el ^{74}W.

24. (a) Hacer una estimación a grosso modo, del voltaje de aceleración mínimo, que se requiere en un tubo de rayos-X con ánodo de ^{26}Fe para que emita una línea L_α de su espectro. (Sugerencia: como en el ejemplo 9-5, $Z_2 \simeq Z - 10$.) (b) Estimar también la longitud de onda del fotón L_α.

25. (a) Utilizar los resultados de Moseley de la figura 9-18 para determinar los valores de las constantes C y a en su fórmula empírica (9-31). (b) Comparar estos valores con los de (9-30), que se derivó de los resultados de la teoría de Hartree.

26. Se sospecha que en un trozo de aleación el cobalto casi no se mezcla con el fierro. Para encontrar regiones de alta concentración de cobalto se toma una radiografía (rayos-X) del trozo. (a) Predecir el umbral de absorción K de sus constituyentes. (b) Después, determinar la energía de un fotón de rayos-X que daría un buen contraste. Es decir, determinar una energía del fotón para la cual la probabilidad de absorción por un átomo de cobalto es muy diferente de la probabilidad de absorción por un átomo de fierro.

10

Atomos multielectrónicos Excitaciones ópticas

10.1 Introducción 407

Interacciones que experimentan electrones atómicos; producción de excitaciones ópticas.

10.2 Atomos alcalinos 408

Electrones ópticamente activos; niveles de energía del hidrógeno, litio y sodio; interpretación de Hartree; estructura fina; reglas de selección.

10.3 Atomos con varios electrones ópticamente activos 412

Limitaciones de la aproximación de Hartree; interacciones de Coulomb residual y spin-órbita; tendencia de los spin para acoplarse; tendencia opuesta de cada spin para acoplarse a su impulso angular orbital; acoplamiento *LS;* impulso angular de spin total y el número cuántico s'; impulso angular orbital total y el número cuántico l'; impulso angular total y el número cuántico j'; acoplamiento *JJ* .

10.4 Acoplamiento LS 416

Representación geométrica; número cuántico m'_j ; condiciones que satisfacen s', l' y j'; niveles de energía en configuración de acoplamiento *LS* típica; notación espectroscópica; multipletes, regla del intervalo de Landé; prueba del acoplamiento *LS;* asignación experimental de los números cuánticos.

10.5 Niveles de energía del átomo de carbono 422

Tratados como un ejemplo del análisis precedente; desdoblamiento hiperfino; principio de exclusión en el acoplamiento *LS;* propiedades de las subcapas llenas; reglas de selección.

10.6 El efecto Zeeman 425

Efectos normal y anómalo; estudio cualitativo; derivación del factor g de Landé; reglas de selección; resonancia del spin electrónico; asignación experimental de los números cuánticos; efecto de Paschen-Bach; reglas de selección.

10.7 Resumen 432

Propiedades tabuladas de las interacciones que experimentan electrones atómicos en subcapas llenas en menos de la mitad; subcapas llenas más de la mitad.

Preguntas 433

Problemas 434

10

Atomos multielectrónicos Excitaciones ópticas

10.1 Introducción

La descripción del comportamiento de los electrones en átomos multielectrónicos implica una sucesión de aproximaciones cada vez más acertadas. En el primer paso, solo se consideran las interacciones más fuertes que sienten los electrones atómicos. Esta es la aproximación de Hartree, que se estudió en el capítulo anterior, en la que se considera a cada electrón como moviéndose independientemente en un potencial neto esféricamente simétrico que describe sus interacciones de Coulomb promedio con el núcleo y con los otros electrones. En los pasos siguientes, la descripción se va haciendo cada vez más precisa, al ir tomando en cuenta, sucesivamente, las interacciones más débiles que experimentan los electrones. En un átomo multielectrónico típico, estas interacciones débiles incluyen dos que implican desviaciones del potencial de Coulomb que realmente experimenta un electrón atómico respecto al promedio descrito por el potencial neto. Una de éstas, conduce a un acoplamiento entre los impulsos angulares orbitales de los electrones, y la otra conduce a un acoplamiento entre los impulsos angulares de spin de los electrones mediante un efecto interesante de la fuerza de intercambio. Una tercera interacción débil implica los campos magnéticos internos del átomo que conducen a un acoplamiento entre los impulsos angulares orbital y de spin. Se puede presentar una cuarta interacción débil en un átomo, si éste se coloca en un campo magnético externo, como en el llamado efecto Zeeman. En este capítulo se analizarán, cualitativamente, los pasos en estas aproximaciones sucesivas y este estudio será utilizado para describir el comportamiento de los electrones atómicos. Es decir, se considerarán las cuatro interacciones más débiles que experimentan estos electrones y se verá que proporcionan una explicación muy satisfactoria de las propiedades importantes de los estados base y de los estados excitados de baja energía de todos los átomos.

Un átomo pasa de su estado base a uno de sus estados excitados más bajos, cuando un electrón en una de sus subcapas externas recibe una pequeña cantidad de energía. Como ejemplo, ésto puede ocurrir cuando un átomo choca con otro átomo en un tubo de descarga de gas. El campo de Coulomb del átomo incidente puede actuar sobre un electrón de una subcapa externa del átomo blanco y proporcionarle algunos electronvolts de energía de excitación. En el proceso de desexcitación, el átomo que ha recibido la energía pasa de su estado inicial excitado a un estado base, emitiendo un conjunto de fotones de baja energía cuyas frecuencias constituyen el *espectro óptico de líneas*. Por lo tanto, a la excitación inicial se le llama excitación óptica. Nótese la diferencia entre una excitación óptica que implica proporcionar una pequeña cantidad de energía a un electrón en una subcapa externa, y una excitación de rayos X que implica proporcionar una cantidad grande de energía a un electrón de una subcapa interna.

Desde luego que vale la pena estudiar los estados excitados de baja energía que se presentan en la producción de espectros de líneas ópticos. Una de las razones es que el estudio de estos estados excitados de los átomos, conduce a una descripción extremadamente completa de sus estados base. Otra razón, es que las ideas generales detrás del procedimiento de aproximaciones sucesivas que se utiliza en este estudio, son similares a las ideas que están detrás de los procedimientos que se utilizan en la ciencia y en la ingeniería para desglosar un problema complicado, en una secuencia de pasos no muy complicados. Los detalles de este procedimiento serán particularmente interesantes para aquellos estudiantes que continuarán sus estudios de física más allá del nivel de este libro, ya que se relacionan estrechamente con los utilizados en la teoría de moléculas, núcleos y partículas elementales. Además, los espectros ópticos son en sí de gran interés práctico, ya que constituyen técnicas experimentales valiosas en muchos campos. Seguramente, el mejor ejemplo de lo anterior es la astronomía, puesto que mucho de lo que se sabe de las estrellas se ha obtenido mediante la medición y el análisis de espectros ópticos. El patrón de líneas que se observa en los espectros de emisión, es utilizado para identificar la composición de las estrellas; la intensidad en las líneas que se observan en espectros de absorción, es utilizada para determinar las temperaturas de las superficies estelares; el corrimiento Doppler de las líneas espectrales es utilizado para medir velocidades de estrellas; y el efecto Zeeman es utilizado para medir los campos magnéticos producidos por estrellas.

10.2 Atomos alcalinos

El estudio de las excitaciones ópticas en átomos multielectrónicos se inició con el caso más simple, los *átomos alcalinos.* En sus estados base, estos átomos contienen un conjunto de subcapas llenas, siendo una subcapa p la de mayor energía mientras que un solo electrón adicional se encuentra en la subcapa s siguiente. Como se dijo en la sección 9-7, la energía de los electrones en una subcapa p es bastante más negativa que la energía de los electrones en la subcapa s siguiente. En consecuencia, los electrones de la subcapa p no pueden ser excitados mediante los procesos de baja energía que conducen a la producción de espectros ópticos. Básicamente, los átomos alcalinos consisten de una coraza de gas noble inerte más un solo electrón que se mueve en una subcapa externa. El análisis del espectro óptico de líneas de un átomo alcalino, en términos de sus estados excitados, es bastante simple ya que los estados excitados pueden ser descritos completamente, describiendo un solo electrón llamado *electrón ópticamente activo,* y la coraza de subcapas llenas puede ser ignorada. La energía total de la coraza no cambia, por lo que la energía total del átomo será una constante, más la energía del electrón ópticamente activo. En el análisis de los estados excitados de un átomo alcalino, es conveniente definir el cero de la energía total de un modo tal, que la energía total del átomo sea igual a la del electrón ópticamente activo. Utilizando esta definición, en la figura 10-1 se presentan diagramas que muestran las energías del estado base y los primeros estados excitados de los átomos alcalinos ^{3}Li y ^{11}Na, que se obtuvieron de un análisis de los espectros ópticos de estos elementos, así como los niveles de energía del ^{1}H para $n = 2, 3, 4, 5,$ y 6. Cada nivel de energía está denotado por los números cuánticos n y l del electrón ópticamente activo, es decir, por su configuración. Estos diagramas no muestran desdoblamientos debidos a estructura fina, que se discutirán adelante.

La teoría de Hartree funciona particularmente bien como un primer paso en el cálculo de los niveles de energía del electrón ópticamente activo de un átomo alcalino ya que el potencial neto $V(r)$, debido al núcleo y los electrones de la coraza en estos átomos es realmente esféricamente simétrico como se supone en la teoría. Las energías que predice la teoría se encuentran en gran concordancia con las que se muestran en la figura 10-1. Además, la teoría facilita entender la estructura de estos niveles de energía y su relación al diagrama para ^{1}H. La dependencia de la energía del electrón ópticamente activo con sus números cuánticos n y l es justamente la descrita en el capítulo anterior. Dada una n, la energía es más negativa para el

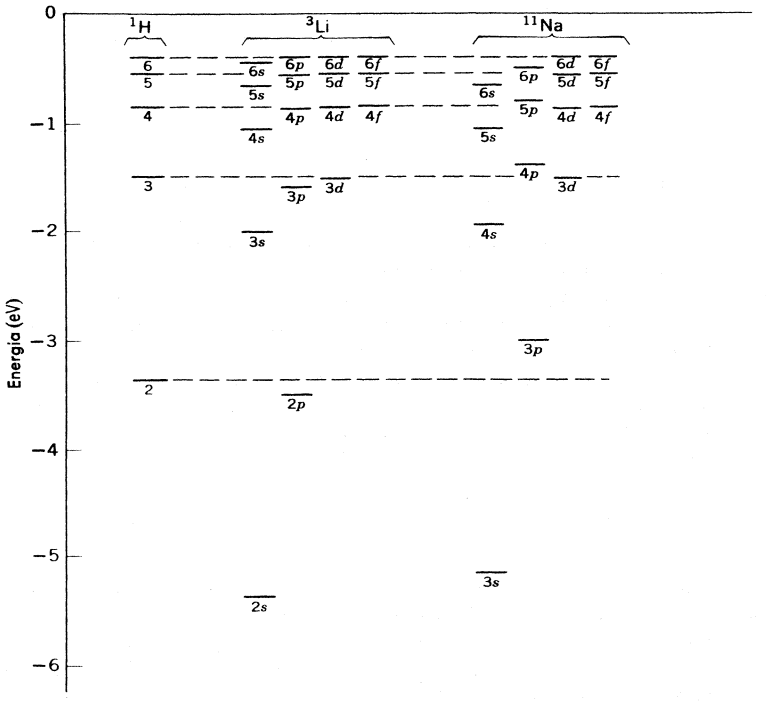


FIGURA 10-1
Algunos de los niveles de energía de los átomos de hidrógeno, litio y sodio.

valor más pequeño de l ya que el electrón pasa más tiempo cerca del centro del átomo donde experimenta la carga nuclear total. En el estado base del átomo ^{3}Li el electrón ópticamente activo se encuentra en la subcapa $2s$ y su energía es aproximadamente 2eV más negativa que la correspondiente al electrón $n = 2$ en el átomo de ^{1}H. En el primer estado excitado, el electrón ópticamente activo se encuentra en la subcapa $2p$ y su energía es sólo aproximadamente de 0.2eV más negativa que el electrón con $n = 2$ en el átomo de ^{1}H. Para el ^{11}Na la dependencia en l hace que el nivel de $4s$ sea más negativo que el nivel $3d$. Sin embargo, en las subcapas de radios grandes y valores grandes de n, la dependencia en l se vuelve menos importante, y los niveles de energía de los electrones ópticamente activos se encuentran muy próximos a los niveles de energía de un electrón en el átomo de ^{1}H. La razón de ésto se encuentra en que el apantallamiento de la carga nuclear $+Ze$ por la carga $-(Z - 1)e$ de los electrones de la coraza de los átomos alcalinos, se vuelve prácticamente completa para electrones en subcapas de radios grandes comparados con el radio de la coraza, de modo que el electrón experimenta esencialmente la misma interacción de Coulomb debido a una sola carga $+e$, que un electrón en el átomo de ^{1}H.

Las líneas del espectro óptico emitidas por los elementos alcalinos presentan un desdoblamiento de estructura fina que indican que todos los niveles de energía se duplican, excepto aquellos para los que $l = 0$. Esto se debe a la interacción spin-órbita que actúa sobre el electrón activo, es decir, debida al acoplamiento entre el momento dipolar magnético del electrón y el campo magnético interno que experimenta debido a que se mueve en el campo eléctrico del átomo. Otros efectos relativistas tan importantes como la interacción spin-órbita en el caso de

átomos con un solo electrón, son generalmente inapreciables para los electrones activos de *todos* los átomos multielectrónicos. Esto puede verse utilizando el resultado del modelo de Bohr en (4-17),

$$v = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}$$

para estimar la velocidad promedio v de un electrón ópticamente activo, siempre que se sustituya Z por Z_n. Como Z_n/n es aproximadamente igual a uno para los electrones ópticamente activos de todos los átomos, la ecuación demuestra que el valor promedio de v/c es aproximadamente igual a su valor en el estado base del átomo de ^{1}H; es decir,, $v/c \simeq 10^{-2}$. Por lo tanto, los efectos relativistas asociados a electrones ópticamente activos son del mismo orden de magnitud a través de toda la tabla periódica. Por el contrario, más adelante se verá que la interacción spin-órbita aumenta rápidamente en magnitud al pasar del ^{1}H a los elementos colocados más arriba en la tabla periódica y por lo tanto domina los demás efectos relativistas.

El desdoblamiento de los niveles de energía de un elemento alcalino debido a la interacción spin-órbita que actúa sobre el electrón ópticamente activo, puede entenderse considerando la energía de interacción (8-35)

$$\overline{\Delta E} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\overline{\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}}$$

Los argumentos que conducen a esta ecuación se aplican tanto al electrón ópticamente activo en un átomo alcalino como al electrón en un átomo con un solo electrón, siempre y cuando $V(r)$ sea igual al potencial neto de Hartree y el valor de expectación de $(1/r)dV(r)/dr$ se calcule utilizando la densidad de probabilidad que se obtiene de las eigenfunciones de Hartree. Como sucede en el caso de átomos con un electrón, cuando se incluye la interacción spin-órbita, las eigenfunciones que describen al electrón ópticamente activo de un átomo alcalino, estarán marcadas por los números cuánticos n, l, j, m_j. Estos números cuánticos están sujetos a las mismas reglas que antes. Específicamente:

$$s = 1/2 \tag{10-1}$$

$$j = \begin{cases} l - 1/2,\ l + 1/2 & l \neq 0 \\ 1/2 & l = 0 \end{cases} \tag{10-2}$$

$$m_j = -j, -j+1, \ldots, +j-1, +j \tag{10-3}$$

Para $l = 0$ de (8-35) se obtiene la energía de la interacción spin-órbita, $\overline{\Delta E} = 0$. Para otros valores de l, se encuentra que $\overline{\Delta E}$ toma dos valores diferentes, uno positivo y otro negativo, de acuerdo a que $j = l + 1/2$ o $j = l - 1/2$. Por lo tanto, exceptuando el nivel $l = 0$, todos los niveles se desdoblan en dos componentes, una de energía ligeramente mayor para los impulsos angulares de spin y orbital "paralelos" y otra de energía ligeramente menor para cuando estos impulsos angulares son antiparalelos. La diferencia en energía es el trabajo necesario para cambiar la orientación del momento dipolar magnético del electrón en el campo magnético interno del átomo. La magnitud del desdoblamiento en energía, es proporcional al valor esperado de $(1/r)dV(r)/dr$, que determina la intensidad del campo magnético. Como tanto $1/r$ como la derivada del potencial neto $V(r)$ se vuelven grandes para r pequeña, el valor de expectación depende, en primer lugar del comportamiento de $V(r)$ cerca de $r = 0$.

De acuerdo con (9-25) para el potencial neto $V(r)$ de la teoría de Hartree, entre más grande es el valor de Z, más rápidamente $V(r)$ se vuelve negativo a medida que r disminuye, por lo tanto, la magnitud de $dV(r)/dr$ aumenta, a medida que Z aumenta, cerca de $r = 0$. En consecuencia, $\overline{(1/r)dV(r)/dr}$, y el desdoblamiento spin-órbita deberían aumentar en magnitud cuando Z aumenta. Este comportamiento puede encontrarse en los datos experimentales de la tabla 10-1, en

TABLA 10-1. Desdoblamientos spin-órbita en varios átomos alcalinos.

Elemento	^{3}Li	^{11}Na	^{19}K	^{37}Rb	^{55}Cs
Subcapa	$2p$	$3p$	$4p$	$5p$	$6p$
Desdoblamiento spin-órbita (eV)	0.42×10^{-4}	21×10^{-4}	72×10^{-4}	295×10^{-4}	687×10^{-4}

la que se enumeran los desdoblamientos observados de los niveles de energía de un electrón excitado a la primer subcapa p de varios átomos alcalinos.

Las líneas espectrales de un átomo alcalino, se emiten por transiciones entre niveles de energía cuyos números cuánticos satisfacen las *reglas de selección:*

$$\Delta l = \pm 1 \tag{10-4}$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \tag{10-5}$$

Estas reglas de selección para las transiciones del electrón ópticamente activo de un átomo alcalino, son exactamente las mismas que las correspondientes al electrón en un átomo con un solo electrón y además, tienen la misma explicación. Desde luego, las frecuencias de las líneas espectrales son iguales a la diferencia de energía de los niveles implicados en las transiciones, dividido entre la constante de Planck.

Si no se coloca un átomo alcalino en un campo magnético externo, solo una de las interacciones más débiles, mencionadas en la sección 10-1, actúa sobre el electrón ópticamente activo. Esta es la interacción spin-órbita que resulta de la presencia de un campo magnético interno en el átomo. No hay interacciones más débiles que resulten de desviaciones de las interacciones de Coulomb experimentadas por el electrón ópticamente activo, del promedio descrito por el potencial neto esféricamente simétrico $V(r)$. La razón es que el potencial experimentado por el electrón ópticamente activo, en realidad es esféricamente simétrico ya que los demás electrones en el átomo alcalino se encuentran en una coraza esféricamente simétrica. Pronto se verá que esta simplificación no se aplica para un átomo típico.

Ejemplo 10-1. La luz amarilla de lámparas de vapor de sodio frecuentemente utilizadas en la iluminación de calles, es una línea espectral que resulta de las transiciones $3p$ a $3s$ del átomo de ^{11}Na. (a) Evaluar la longitud de onda de esta línea, utilizando la información contenida en la figura 10-1. (b) La línea se desdobla por la interacción spin-órbita. Calcular la separación en longitudes de onda de las dos componentes a partir de la información contenida en la tabla 10-1. (c) Comentar la aplicabilidad de las reglas de selección a las transiciones implicadas en la emisión de las dos componentes de la línea.

(a) Examinando cuidadosamente la tabla 10-1, se obtiene que la diferencia de energías entre los niveles $3p$ y $3s$ del ^{11}Na es:

$$E_{3p} - E_{3s} \simeq (-3.0\,\text{eV}) - (-5.1\,\text{eV}) = 2.1\,\text{eV}$$

Los fotones emitidos en las transiciones entre estos niveles, llevarán una energía $h\nu = E_{3p} - E_{3s}$, y tendrán frecuencia ν y longitud de onda λ, tales que

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} \simeq \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg} \times 3.0 \times 10^{8}\,\text{m/seg}}{2.1\,\text{eV} \times 1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule/eV}} = 5.9 \times 10^{-7}\,\text{m} = 5900\,\text{Å}$$

El valor que se obtiene directamente de una medida precisa es $\lambda = 5893$ Å.

(b) De acuerdo con la tabla 10-1, la interacción spin-órbita desdobla el nivel $3p$, en una energía $dE = 2.1 \times 10^{-3}$ eV, y como

$$\lambda = c\nu^{-1}$$

se sigue que

$$d\lambda = -c\nu^{-2}\, d\nu$$

y que la magnitud de la separación de las componentes, en longitudes de onda, de la línea espectral es:

$$d\lambda = \frac{c}{\nu^2}\, d\nu = \frac{hch\, d\nu}{(h\nu)^2} = \frac{hc\, dE}{(h\nu)^2}$$

$$\simeq \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg} \times 3 \times 10^{8}\,\text{m/seg} \times 2.1 \times 10^{-3}\,\text{eV} \times 1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule/eV}}{(2.1\,\text{eV} \times 1.6 \times 10^{-19}\,\text{joule/eV})^2}$$

$$= 5.7 \times 10^{-10}\,\text{m} = 5.7\,\text{Å}$$

(c) El nivel $3p$ de mayor energía corresponde a $j = l + 1/2 = 1 + 1/2 = 3/2$, y el nivel $3p$ de menor energía corresponde a $j = l - 1/2 = 1 - 1/2 = 1/2$. El nivel $3s$ no se desdobla puesto que $l = 0$, y $j = 1/2$ únicamente. Para las transiciones entre el nivel $3p$ más alto y el nivel $3s$, $\Delta l = -1$ y $\Delta j = -1$; para transiciones entre el nivel $3p$ más bajo y el nivel $3s$, $\Delta l = -1$ y $\Delta j = 0$. De esta manera, ambas transiciones son permitidas por las reglas de selección de (10-4) y (10-5). ◀

10.3 Atomos con varios electrones ópticamente activos

Ahora se considerará el caso más típico de un átomo que contiene una coraza con subcapas completamente llenas rodeando el núcleo y varios electrones en una subcapa exterior parcialmente llena. Dado que cualquiera de estos electrones puede participar en las excitaciones que conducen a la emisión del espectro óptico del átomo todos los electrones en la subcapa parcialmente llena son opticamente activos. Los estados excitados de un átomo tal, son tratados utilizando primero la aproximación de Hartree, que da cuenta de las interacciones más fuertes que experimentan sus electrones ópticamente activos y después incluyendo los efectos debidos a otras interacciones que aunque más débiles, son importantes.

Es necesario destacar que los átomos que se consideran aquí y en el resto del capítulo, serán aquellos cuya subcapa externa se llene *menos de la mitad*. Si la subcapa se llena más de la mitad, las excitaciones ópticas del átomo se estudian en términos del comportamiento de agujeros (no electrones) como en el análisis del espectro de líneas de rayos-X. Como un agujero representa la ausencia de una carga negativa, es equivalente a la presencia de una carga positiva. Debido a este cambio de signo, ciertos efectos que se tratarán más adelante, presentan un cambio de signo en átomos cuya subcapa externa está llena más de la mitad.

En la aproximación de Hartree, la energía de cada electrón ópticamente activo, moviéndose independientemente, está determinada por sus números cuánticos n y l. La dependencia de estos dos números cuánticos con su energía E_{nl} es similar al caso de un solo electrón ópticamente activo en un átomo alcalino con la misma coraza, ya que el potencial neto no es muy diferente del potencial neto debido a la coraza solamente. Entonces, la energía total del átomo es la energía total constante de la coraza, más la suma de las energías totales de los electrones ópticamente activos. En consecuencia, en la aproximación de Hartree, la energía del átomo queda determinada completamente por la configuración de los electrones ópticamente activos que especifican los números cuánticos n y l de estos electrones. Como para cada l, existen $2l + 1$ valores posibles de m_l y como existen dos valores posibles de m_s, cada configuración tiene cierto número de estados cuánticos diferentes de la misma energía. Por lo tanto, en la aproximación de Hartree existen numerosos niveles de energía degenerados asociados con cada configuración. Muchas de estas degeneraciones pueden eliminarse cuando se toman en

consideración interacciones más débiles, ignoradas en la aproximación de Hartree. Esto es justamente lo que sucede cuando se aplica la interacción spin-órbita a los átomos alcalinos eliminando algunas de las degeneraciones de sus niveles de energía.

Para el tratamiento de los estados excitados de baja energía de átomos típicos, se deben incluir las interacciones más débiles que experimentan los electrones ópticamente activos. Pueden concebirse como correcciones de efectos ignorados en la aproximación de Hartree. Las dos correcciones más importantes son para:

1. *Interacción residual de Coulomb,* interacción eléctrica que compensa el hecho de que el potencial neto de Hartree $V(r)$ que actúa sobre cada electrón ópticamente activo, describe únicamente un efecto *promedio* de las interacciones de Coulomb entre ese electrón y todos los demás electrones ópticamente activos.

2. *Interacción spin-órbita,* interacción magnética que acopla el impulso angular de spin de cada electrón ópticamente activo con su propio impulso angular orbital.

Existen también correcciones relativistas para las interacciones de un electrón ópticamente activo y otro debido a interacciones magnéticas entre los impulsos magnéticos asociados, etc; pero todas éstas son muy pequeñas y generalmente pueden ser ignoradas.

A esta altura, ya se debe estar bastante familiarizado con la interacción spin-órbita ya que se encuentra en el estudio de las excitaciones ópticas de átomos con un electrón y de átomos alcalinos. Sin embargo, la interacción residual de Coulomb, es algo nuevo (excepto por un breve análisis del átomo ^{2}He en la sección 9-4) ya que solo se encuentra en el estudio de las excitaciones ópticas de átomos con dos o más electrones ópticamente activos. En dichos átomos, las interacciones de Coulomb que experimenta un electrón ópticamente activo incluyen las debidas a la presencia de los otros electrones ópticamente activos en la misma subcapa. Dado que la distribución de carga de los otros electrones ópticamente activos no es esféricamente simétrica ya que la subcapa se encuentra solo parcialmente llena, el efecto debido a sus interacciones de Coulomb no es esféricamente simétrico. Por lo tanto, el potencial neto de Hartree $V(r)$ que es esféricamente simétrico, no puede describir adecuadamente las interacciones de Coulomb que realmente experimenta un electrón ópticamente activo, sino solo el mejor promedio esféricamente simétrico, de estas interacciones. Para mayor precisión, deben considerarse las desviaciones respecto a este promedio de las interacciones de Coulomb reales. Asimismo, debe tomarse en cuenta el requisito de que una eigenfunción que describa acertadamente los electrones ópticamente activos, debe ser antisimétrica ante un intercambio de marcas de dos de ellos, ya que este requisito altera su distribución de carga.

Se puede dar un tratamiento cuantitativo, si se suman los valores de expectación de las energías correspondientes a las interacciones residual de Coulomb y spin-órbita a las energías que se obtienen de la teoría de Hartree. Lo anterior es muy parecido al tratamiento del átomo de ^{1}H descrito en la sección 8-6, sólo que en este caso se deben utilizar eigenfunciones antisimétricas para los electrones ópticamente activos. Como a lo más, existen solo unos cuantos electrones ópticamente activos, estas eigenfunciones antisimétricas no son tan complicadas que requieran ser manejadas por una computadora grande. Desde luego que aquí no es posible presentar el tratamiento cuantitativo; en vez de eso, se presenta un estudio cualitativo de los estados excitados de átomos típicos.

Ya se ha contruido la infraestructura para un estudio cualitativo de *un* aspecto de *interacción residual de Coulomb,* en la sección 9-4. El estudiante recordará que el requisito para que la eigenfunción total que describa a dos electrones sea antisimétrica, en un intercambio de sus marcas, introduce una conexión entre las orientaciones relativas de los spin de los electrones y sus coordenadas espaciales relativas (la fuerza de intercambio). La distancia promedio entre los dos electrones es mayor en el estado de triplete donde los spin son "paralelos" que en el estado de singulete donde son "antiparalelos". Por lo tanto la energía positiva de repulsión de Coulomb que actúa entre los dos electrones es menor en los estados de triplete, para los cuales la magnitud del spin total tiene el valor constante de $S' = \sqrt{1(1+1)}\,\hbar$ que en el estado de singulete, en el que tiene el valor constante $S' = 0$. Al final de la sección 9-4, se vió un ejemplo de ésto al considerarse los estados excitados de baja energía del átomo de ^{2}He. En este átomo, el

impulso angular de spin de los dos electrones ópticamente activos, se acoplan para dar un impulso angular de spin total con cualquiera de las magnitudes constantes $S' = \sqrt{1(1+1)}\,\hbar$ o $S' = 0$, al mismo tiempo que mantiene una magnitud constante de sus impulsos angulares de spin individuales. Debido a la conexión entre las orientaciones de spin y las coordenadas espaciales y también a lo que se ha llamado la interacción residual de Coulomb, la energía del átomo es mínima para el estado en que S' es mayor y los electrones están más separados. En el análisis de los espectros experimentales observados, y en el tratamiento teórico cuantitativo, se encuentra que esencialmente el mismo efecto es importante en todos los átomos con dos o más electrones ópticamente activos. Es decir, para dichos átomos, *la interacción residual de Coulomb produce una tendencia a que se acoplen los impulsos angulares de spin de modo tal que la magnitud del impulso angular de spin total S' es constante, y la energía es generalmente más baja en el estado para el que S' es la más grande.*

Fácilmente puede verse que *otro* aspecto de la *interacción residual de Coulomb* es producir una tendencia de los impulsos angulares orbitales de los electrones ópticamente activos a acoplarse de modo tal que la magnitud del impulso angular orbital total L' es constante. Esto sucede simplemente porque en la mayoría de los estados cuánticos, las distribuciones de carga de los electrones no son esféricamente simétricas y por lo tanto se producen impulsos rotativos entre sí. Como las orientaciones espaciales de la distribución de carga de un electrón está relacionada con la orientación espacial de su vector de impulso angular orbital, existen impulsos rotativos que actúan entre los vectores de impulso angular. Estos impulsos no tienden a cambiar la magnitud de los vectores de impulso angular individuales, sino que solo tienden a hacerlos preceder en torno al vector de impulso angular orbital, total, de modo tal que su magnitud L' permanece constante.

Entonces, surge la siguiente pregunta: ¿Cuál de los posibles valores de L' corresponde a la energía más baja? Existen dos tendencias opuestas, pero la base de la que usualmente domina puede entenderse aún mediante la física clásica, considerando dos electrones en un átomo de Bohr, como se ilustra en la figura 10-2. Debido a la repulsión de Coulomb entre los electrones, el arreglo más estable se obtiene cuando los electrones se mantienen en los extremos opuestos de un diámetro. En este estado de energía más baja, los electrones rotan juntos con vectores de impulso angular orbital individual paralelos y, por lo tanto, con la máxima magnitud del vector de impulso angular total L'. Esta conclusión se ve confirmada por el análisis de los espectros producidos por átomos con varios electrones ópticamente activos. Es decir, para dichos átomos *la interacción residual de Coulomb produce una tendencia de los impulsos angulares orbitales de los electrones ópticamente activos, a acoplarse de modo tal que la magnitud del impulso angular orbital total L' es constante y la energía es usualmente más baja para el estado en que L' es la más grande.*

El contraste con las tendencias producidas por la interacción residual de Coulomb, la *interacción spin-órbita produce una tendencia del impulso angular de spin de cada electrón ópticamente activo de acoplarse con su propio impulso angular orbital de modo tal que las magnitudes de estos vectores permanezcan constantes, mientras que preceden en torno a su vector de impulso angular total resultante que tiene magnitud constante J.* Se tiene familiaridad con esta

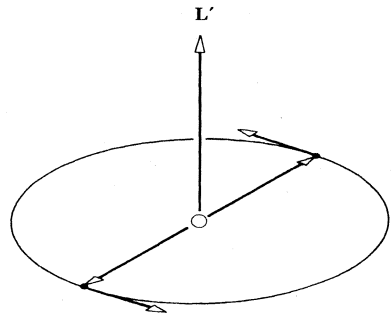


FIGURA 10-2
Dos electrones ópticamente activos que se mueven en la misma órbita de Bohr, tienden a mantenerse en extremos opuestos de uno de los diámetros de modo que minimizan su repulsión de Coulomb. Como resultado, sus impulsos angulares orbitales se acoplan de modo tal que se obtiene un impulso angular orbital total máximo.

endencia en el caso de átomos con un electrón y átomos alcalinos. Se sabe que se debe a mpulsos rotativos que se producen por la interacción de un momento dipolar magnético elacionado con el impulso angular de spin y el campo magnético relacionado con el impulso ngular orbital. También se sabe que la *energía es menor para el estado en el que J es menor* (para ına subcapa llena menos de la mitad).

Las interacciones residual de Coulomb y spin-órbita tienden a producir efectos que se oponen entre sí, sin embargo, para átomos con Z pequeña o intermedia, los efectos de la interacción residual de Coulomb son mucho mayores que los efectos de la interacción spin-órbita. *Exceptuando los átomos de Z grande, la interacción residual de Coulomb se trata primero,* ya que es la más importante y la interacción spin-órbita se ignora temporalmente. Se considera, entonces, que los impulsos angulares de spin individuales, $\mathbf{S}_i$ de los electrones ópticamente activos, se acoplan para formar *un impulso angular de spin total* $\mathbf{S}'$, donde:

$$\mathbf{S}' = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \cdots + \mathbf{S}_i + \cdots \tag{10-6}$$

y donde $\mathbf{S}'$ tiene una magnitud constante que satisface la condición de cuantización

$$S' = \sqrt{s'(s'+1)}\,\hbar \tag{10-7}$$

Así también se considera que los impulsos angulares orbitales individuales $\mathbf{L}_i$ de los electrones ópticamente activos se acoplan para formar un *impulso angular orbital total* $\mathbf{L}'$, donde

$$\mathbf{L}' = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \cdots + \mathbf{L}_i + \cdots \tag{10-8}$$

y donde $\mathbf{L}'$ tiene una magnitud constante que satisface la condición de cuantización

$$L' = \sqrt{l'(l'+1)}\,\hbar \tag{10-9}$$

Estos vectores se acoplan de modo tal que todas sus magnitudes S_i y L_i también permanecen constantes. Debido a la interacción residual de Coulomb, la energía del átomo depende de S' y L', de modo que estados cuánticos de la misma configuración pero asociados con diferentes valores de S' y L', ya no tendrán la misma energía. El estado con los máximos valores posibles de S' y L' usualmente posee la mínima energía.

Habiendo tomado en cuenta la interacción residual de Coulomb dominante, entonces, se incluye la más débil interacción spin-órbita. Esto se realiza considerando una interacción spin-órbita entre los vectores de impulso angular $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$. La interacción acopla estos dos vectores de modo tal que la magnitud J' del *impulso angular* total

$$\mathbf{J}' = \mathbf{L}' + \mathbf{S}' \tag{10-10}$$

es constante y S' y L' permanecen constantes. La magnitud de J' está cuantizada también de acuerdo con la condición usual

$$J' = \sqrt{j'(j'+1)}\,\hbar \tag{10-11}$$

Como resultado de la interacción spin-órbita la energía del átomo depende también de J'. El estado con el mínimo valor posible de J', posee la mínima energía. El procedimiento descrito en los últimos párrafos, es comúnmente llamado *acoplamiento LS,* sin embargo, también es llamado *acoplamiento Russell-Saunders* por los dos astrónomos que primeramente lo utilizaron en el estudio de los espectros atómicos emitidos por las estrellas. El procedimiento es válido, excepto para átomos de Z grande.

El estudiante debe ser prevenido de que el nombre común frecuentemente ocasiona confusión ya que parece implicar que el acoplamiento entre los vectores L y S es el más importante. En el acoplamiento LS el acoplamiento de los vectores L individuales para formar

el vector L total, y también el acoplamiento de los vectores S individuales para formar el vector S total, son los más importantes ya que tienen el efecto más grande en la energía. El acoplamiento del vector L total con el vector S total es menos importante ya que su efecto en la energía es menor.

Si Z es grande, la interacción spin-órbita es demasiado fuerte (ver tabla 10-1) como para poder justificar el ignorarla, aún temporalmente. Esto complica la situación ya que tanto la interacción residual de Coulomb como la interacción spin-órbita, deben tratarse simultáneamente. Para átomos con la Z más grande, la interacción spin-órbita empieza a dominar la interacción residual de Coulomb, y el procedimiento se simplifica puesto que se hace posible un tratamiento secuencial, una vez más. Este procedimiento, llamado *acoplamiento JJ*, implica tratar primero el acoplamiento relativamente fuerte de los impulsos angulares orbital y de spin de cada electrón ópticamente activo del átomo con Z grande, para formar su impulso angular total y después tratar el acoplamiento relativamente débil de estos impulsos angulares para formar el impulso angular total para todos los electrones. Ya que la mayoría de los átomos son o buenos, o regulares ejemplos de acoplamiento LS, éste es el único procedimiento que se considerará en este capítulo. En el capítulo 15 se considerará el acoplamiento JJ en relación con el comportamiento de protones y neutrones en el núcleo, ya que en todos los núcleos estas partículas se mueven bajo la influencia de una interacción spin-órbita muy fuerte.

10.4 Acoplamiento *LS*

En la figura 10-3 se muestra la forma como los diversos vectores de impulso angular se combinan en el acoplamiento *LS*, en el estado que normalmente es el de *mínima energía* para dos electrones ópticamente activos con números cuánticos $l_1 = 1$, $s_1 = 1/2$, y $l_2 = 2$, $s_2 = 1/2$. Los impulsos angulares de spin $\mathbf{S}_1$ y $\mathbf{S}_2$ preceden en torno a su suma $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{S}'$ tiene su máxima magnitud posible (correspondiente a $s' = 1$) . La precesión es rápida ya que su acoplamiento es relativamente fuerte. Los impulsos angulares orbitales $\mathbf{L}_1$ y $\mathbf{L}_2$ preceden rápidamente en torno a su suma $\mathbf{L}'$ ya que su acoplamiento es también relativamente fuerte, y $\mathbf{L}'$ también tiene su magnitud máxima posible. (Correspondiente $l' = 3$). Además, existe una precesión lenta de $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ en torno a su suma $\mathbf{J}'$ con $\mathbf{J}'$ teniendo la magnitud mínima posible (correspondiente a $j' = 2$). Esta precesión es lenta ya que el acoplamiento entre $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ es relativamente débil. Finalmente $\mathbf{J}'$ precede aleatoriamente en torno al eje z para satisfacer el principio de incertidumbre del impulso angular, siendo su componente a lo largo de ese eje, J'_z , una constante dada por la condición de cuantización

$$J'_z = m'_j \hbar \tag{10-12}$$

donde

$$m'_j = -j', -j' + 1, \ldots, +j' - 1, +j \tag{10-13}$$

La figura 10-3 se dibujó para $m'_j = j'$. La cuantización de la magnitud del impulso angular total J', y de su componente z, J'_z, es un requisito necesario de la ausencia de impulsos rotativos externos actuando sobre el átomo; es decir, es una consecuencia de la ley de conservación del impulso angular en mecánica cuántica.

En la figura 10-3 se muestra solo uno de los estados cuánticos que se pueden formar mediante acoplamiento *LS*, por dos electrones ópticamente activos con números cuánticos $l_1 = 1$, $s_1 = 1/2$, y $l_2 = 2$, $s_2 = 1/2$. De hecho, existen doce conjuntos de estados, con diferentes números cuánticos s', l', j', que pueden ser formados por estos dos electrones; cada uno de estos doce conjuntos contiene estados con $2j' + 1$ diferentes valores posibles de m'_j. Las reglas que especifican los valores posibles de s', l', j', se pueden expresar muy convenientemente por medio de diagramas de adición vectorial, empleando vectores cuyas longitudes son proporcionales a los números cuánticos, de la misma forma como se hizo en la sección 8-5. Estos diagramas tienen la forma que se presenta en la figura 10-4, para los dos electrones en cuestión.

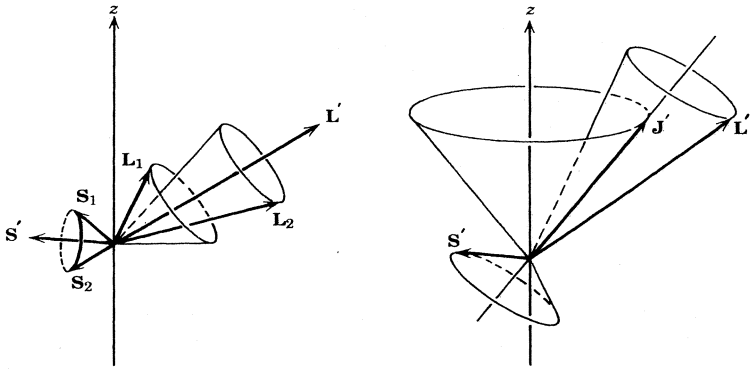


FIGURA 10-3
Acoplamiento de varios vectores de impulso angular en un estado típico de acoplamiento de *LS* de mínima energía. *Izquierda:* Impulsos angulares orbitales $\mathbf{L}_1$ y $\mathbf{L}_2$ de dos electrones, preceden rápidamente en torno a su vector suma $\mathbf{L}'$. Similarmente, sus spin $\mathbf{S}_1$ y $\mathbf{S}_2$ preceden rápidamente respecto a su suma $\mathbf{S}'$. *Derecha:* El impulso angular orbital total $\mathbf{L}'$ y el impulso angular total de spin $\mathbf{S}'$ preceden lentamente respecto a su suma $\mathbf{J}'$ el impulso angular total. Por último, $\mathbf{J}'$ precede aleatoriamente en torno al eje z.

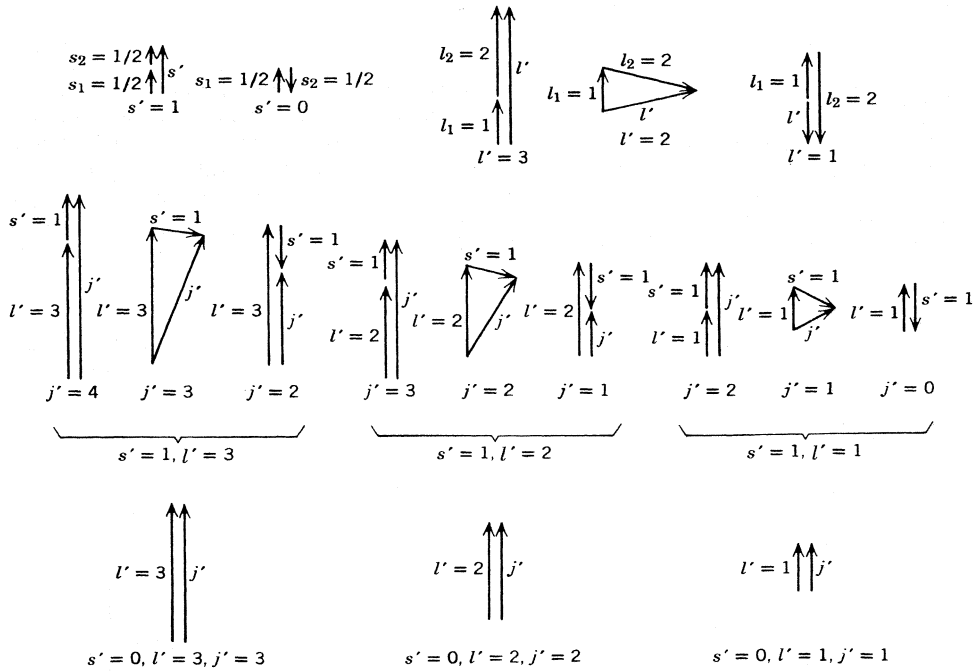


FIGURA 10-4.
Diagramas de adición vectorial para los números cuánticos $l_1 = 1$, $s_1 = 1/2$; $l_2 = 2$, $s_2 = 1/2$.

El estudiante podrá verificar que los valores posibles de s', l', j' que se muestran en los diagramas vectoriales, concuerdan con los que se obtienen de las ecuaciones

$$\begin{aligned} s' &= |s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \ldots, s_1 + s_2 \\ l' &= |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \ldots, l_1 + l_2 \\ j' &= |s' - l'|, |s' - l'| + 1, \ldots, s' + l' \end{aligned} \tag{10-14}$$

Ahora bien, como $s_1 = s_2 = 1/2$, de la primera ecuación se obtiene

$$s' = 0, 1$$

Esto es lo mismo que (9-21). Las otras ecuaciones pueden ser verificadas por el mismo tipo de argumentos de desigualdad entre vectores que se utilizaron para probar (8-33). Para el caso de tener más de dos electrones ópticamente activos, se pueden utilizar generalizaciones obvias de los diagramas vectoriales para encontrar los números cuánticos posibles.

Ejemplo 10-2. Encontrar los valores posibles de s', l', y j' para una configuración con tres electrones ópticamente activos de números cuánticos $l_1 = 1$, $l_2 = 2$, y $l_3 = 4$.

Con el auxilio de la construcción que se muestra en la figura 10-5, se concluye que el valor mínimo de s' es 1/2 y que el valor máximo de s' es 3/2. Por lo tanto, los valores posibles son $s' = 1/2, 3/2$. La construcción también muestra que el valor mínimo de l' es 1 y que el valor máximo de l' es 7, de modo que, los valores posibles son $l' = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$. Entonces los valores posibles de j' son $j' = 1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, 11/2, 13/2, 15/2, 17/2$. En las figuras 10-5 y 10-4 no se indican los $2j' + 1$ valores posibles de m_j' para cada valor de j'. En ausencia de campos externos, la energía del átomo no depende de m_j'. ◀

En la figura 10-6 se muestra el desdoblamiento de un nivel singularmente degenerado de una configuración atómica con dos electrones ópticamente activos, debido a las interacciones residual de Coulomb y spin-órbita. La configuración es $3d^14p^1$, en forma abreviada $3d4p$, que implica los mismos números cuánticos, $l_1 = 1$, $s_1 = 1/2$; $l_2 = 2$, $s_2 = 1/2$, que se consideraron en las figuras 10-3 y 10-4. En la figura también se muestra la notación utilizada por los espectroscopistas para señalar los números cuánticos de los niveles. Por ejemplo, el nivel de más baja energía se identifica por el símbolo $3d4p\ {}^3F_2$. La primera parte del símbolo propor-

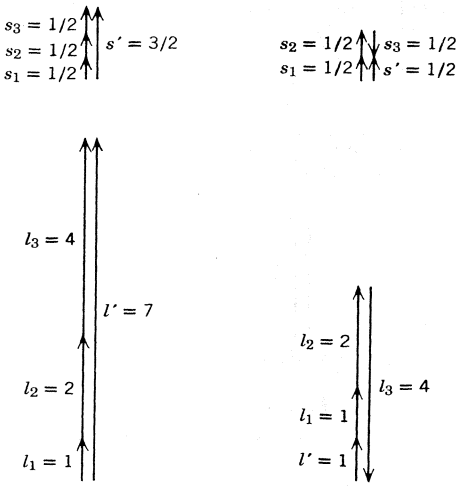


FIGURA 10-5
Diagramas de adición vectorial para los valores máximo y mínimo de s' y l' en una configuración de tres electrones ópticamente activos con $l_1 = 1$, $l_2 = 2$, y $l_3 = 4$.

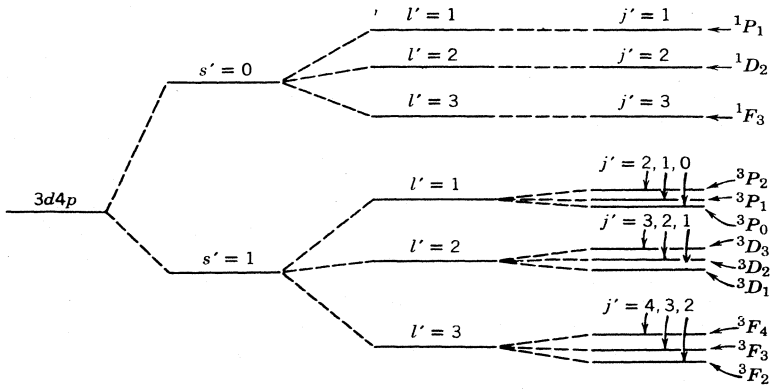


FIGURA 10-6
Desdoblamiento de los niveles de energía en una confirmación de acoplamiento *LS* típica.

ciona la configuración. La segunda parte proporciona los valores de s', l', j'. La letra especifica el valor de l' de acuerdo con el esquema de la tabla 9-3 (excepto que resulta conveniente utilizar letras mayúsculas), es decir, F quiere decir $l' = 3$. El subíndice indica el valor de j'; es decir, $j' = 2$. El superíndice es igual a $2s' + 1$ (y si $s' \leq l'$, también es igual al número de componentes en que se desdoblan los niveles por la interacción spin-órbita); es decir, $2s' + 1 = 3$ de modo que $s' = 1$. La segunda parte del símbolo se lee "triplete F 2."

No se pueden presentar ecuaciones explícitas de las que se puedan evaluar todas las energías de los niveles de la figura 10-6, pero se puede escribir una ecuación que proporciona la dependencia con j' de la energía de interacción spin-órbita. Esta dependencia desdobla los niveles para $s' = 1$ y una l' dada, en un triplete de niveles. Una vez más se considera (8-35) para la energía de interacción spin-órbita, escribiéndola como:

$$\overline{\Delta E} = K[j'(j' + 1) - l'(l' + 1) - s'(s' + 1)] \tag{10-15}$$

Esta ecuación predice los valores de expectación de la energía de interacción de los vectores de impulso angular total de spin y orbital $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ siempre que el acoplamiento LS sea válido, de modo que estos vectores sean significativos. La cantidad K no solo es proporcional a un término como $\overline{(1/r)\, dV(r)/dr}$, como podrá esperarse de las aplicaciones anteriores de (8-35), ya que el potencial es más complicado en esta situación, sin embargo, K tiene el mismo valor para todos los niveles de energía del llamado *multiplete;* es decir, para todos los niveles de energía de una configuración con valores de s' y l'. Por lo tanto, a partir de (10-15), se puede calcular la separación en energía de los niveles adyacentes de un multiplete. Si el número cuántico asociado con el nivel de energía más bajo es j' el número cuántico asociado con el nivel de mayor energía es $j' + 1$, y la separación $\mathscr{E}$ en la energía de los dos niveles es

$$\begin{aligned}\mathscr{E} &= K[(j' + 1)(j' + 2) - l'(l' + 1) - s'(s' + 1)] \\ &\quad - K[j'(j' + 1) - l'(l' + 1) - s'(s' + 1)] \\ &= K[(j' + 1)(j' + 2) - j'(j' + 1)]\end{aligned}$$

de donde se obtiene el sencillo resultado

$$\mathscr{E} = 2K(j' + 1) \tag{10-16}$$

Por lo tanto, se puede ver que *la separación en energía $\mathscr{E}$ de los niveles adyacentes en un múltiplete, es proporcional al número cuántico del impulso angular total del nivel de mayor energía.* Esta predicción de (10-16) se conoce como *regla del intervalo de Landé.* Como se verá en los ejemplos 10-3 y 10-4, es ampliamente utilizada en la física atómica. En la física molecular y física nuclear, se utiliza esencialmente la misma regla.

Ejemplo 10-3. En la configuración $3d3d$ del átomo ^{20}Ca, existe un multiplete (en este caso un triplete) de los niveles: $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$. Se observa que el nivel de más baja energía es el $^3P_0$, el siguiente es $^3P_1$, y el más alto $^3P_2$. La separación en energía $\mathscr{E}$ medida entre los niveles $^3P_1$ y $^3P_0$ es 16.7×10^{-4} eV, y medida entre los niveles $^3P_2$ y $^3P_1$ es 33.3×10^{-4} eV. Comparar estos valores de $\mathscr{E}$ con las predicciones de la regla del intervalo de Landé, (10-16).

La teoría no predice un valor exacto de K en (10-16), pero sí predice que K tiene el mismo valor para todos los niveles del multiplete. Por lo tanto, se puede obtener una predicción acertada para el cociente entre los dos valores de $\mathscr{E}$. Para el nivel de energía más bajo, $j' = 0$; para el siguiente $j' = 1$; y para el más alto $j' = 2$. Por lo tanto, la regla del intervalo de Landé predice

$$\frac{\mathscr{E}(^3P_2, ^3P_1)}{\mathscr{E}(^3P_1, ^3P_0)} = \frac{2K(j'+1)_{j'=1}}{2K(j'+1)_{j'=0}} = \frac{2}{1}$$

La razón entre los valores medidos de $\mathscr{E}$ es:

$$\frac{\mathscr{E}(^3P_2, ^3P_1)}{\mathscr{E}(^3P_1, ^3P_0)} = \frac{33.3 \times 10^{-4}\,\text{eV}}{16.7 \times 10^{-4}\,\text{eV}} = 1.99$$

Esta gran concordancia entre los valores experimentalmente medidos y teóricamente predichos de las razones del $\mathscr{E}$ proporcionan la evidencia para el acoplamiento LS en el átomo de ^{20}Ca. En otras palabras, la regla del intervalo de Landé puede utilizarse como prueba de que hay acoplamiento LS ◀

El primer renglón en la tabla 10-2 sintetiza la exitosa prueba de la regla del intervalo de Landé para la presencia de acoplamiento LS que se realizó en el ejemplo 10-3, para el triplete en una de las configuraciones del átomo de ^{20}Ca. Los otros renglones muestran los resultados igualmente satisfactorios de aplicar la misma prueba a tripletes en otras configuraciones de ese átomo. En conjunto, estas pruebas aportan evidencias convincentes de la presencia de acoplamiento LS en el átomo de ^{20}Ca. Cuando estas mismas pruebas son aplicadas a multipletes en varias configuraciones de otros átomos con más de un electrón ópticamente activo, demuestran que el acoplamiento LS está presente en todos esos átomos de Z pequeña e intermedia.

Ejemplo 10-4. Medidas realizadas sobre el espectro de líneas, emitido por cierto átomo de Z intermedia, muestran que la separación entre niveles de energía adyacentes, en orden creciente de energía, en un multiplete particular, se encuentra aproximadamente en razón de 3 a 5. Utilice la regla del intervalo de

TABLA 10-2. Desdoblamientos de estructura fina en el átomo de calcio.

Configuración	Niveles	Separación	Niveles	Separación	Razón (Exp.)	Razón (Teo.)
$3d3d$	$^3P_1$, $^3P_0$	16.7×10^{-4} eV	$^3P_2$, $^3P_1$	33.3×10^{-4} eV	1.99	2/1
$4s4p$	$^3P_1$, $^3P_0$	64.9×10^{-4} eV	$^3P_2$, $^3P_1$	131.2×10^{-4} eV	2.02	2/1
$4s3d$	$^3D_2$, $^3D_1$	16.9×10^{-4} eV	$^3D_3$, $^3D_2$	26.9×10^{-4} eV	1.59	3/2
$3d4p$	$^3D_2$, $^3D_1$	33.1×10^{-4} eV	$^3D_3$, $^3D_2$	49.6×10^{-4} eV	1.50	3/2

Landé para asignar los números cuánticos s', l', j' a dichos niveles. Este ejemplo presenta una visión más clara del procedimiento utilizado por el espectroscopista experimental para analizar sus medidas.

En el diagrama de niveles de energía de la figura 10-7 se presenta la información experimental. Si la separación entre el par de niveles de energía más baja es $\mathscr{E}$, entonces, la separación entre el par de niveles de energía más alta es, aproximadamente $(5/3)\mathscr{E}$. A pesar de que inicialmente no se conocen los valores de j' para los niveles, si se sabe que los valores posibles difieren entre sí por uno, y que el nivel de energía más bajo corresponde al valor más bajo de j'. De este modo, si el nivel de energía más bajo tiene el número cuántico j' a los niveles de energía sucesivamente mayores corresponderán los números cuánticos $j' + 1$ y $j' + 2$

Ahora bien, la regla del intervalo de Landé afirma que la separación entre niveles adyacentes es proporcional al valor de j' del nivel más alto, de modo que la separación entre el par de niveles más bajos será

$$\mathscr{E} = 2K(j' + 1)$$

y la separación entre el par de niveles más altos será

$$(5/3)\mathscr{E} = 2K(j' + 2)$$

Dividiendo la primera ecuación entre la segunda, para eliminar la incógnita K, se obtiene

$$\frac{3\mathscr{E}}{5\mathscr{E}} = \frac{2K(j' + 1)}{2K(j' + 2)}$$

de donde se obtiene

$$5j' + 5 = 3j' + 6$$

o bien,

$$2j' = 1$$

y por lo tanto

$$j' = 1/2$$

Así pues, los valores de j' son, en orden creciente de energía, $j' = 1/2, 3/2, 5/2$.

Para determinar los valores de s' y l' del multiplete, se utiliza la tercera de las ecuaciones (10-14)

$$j' = |s' - l'|, |s' - l'| + 1, \ldots, s' + l'$$

Como el valor mínimo de j' es 1/2 y el máximo es 5/2, se tiene

$$|s' - l'| = 1/2$$

y

$$s' + l' = 5/2$$

Para manejar los valores absolutos, se consideran dos casos. En el primer caso $s' \geq l'$, y estas dos ecuaciones son:

$$s' - l' = 1/2$$

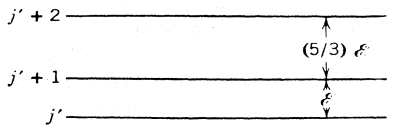


FIGURA 10-7
Ilustración de como se asignan los números cuánticos en un multiplete, a partir de la separación observada de los niveles.

y

$$s' + l' = 5/2$$

sumando se obtiene

$$2s' = 6/2 \qquad \text{o} \qquad s' = 3/2$$

Restando se obtiene

$$2l' = 4/2 \qquad \text{o} \qquad l' = 1$$

En el segundo caso $s' \leq l'$, y las ecuaciones que deben resolverse son

$$-(s' - l') = 1/2$$

y

$$s' + l' = 5/2$$

sumando se obtiene

$$2l' = 6/2 \qquad \text{o} \qquad l' = 3/2$$

Pero ésto no es posible, ya que el número cuántico correspondiente al impulo angular orbital total l' no puede tomar un valor semientero. Por lo tanto, el primer caso $s' \geq l'$, es el correcto y se concluye que $s' = 3/2$ y $l' = 1$.

El espectroscopista realiza este procedimiento en todos los multipletes de una configuración particular, agrupando los niveles en configuraciones de acuerdo con la similitud de sus energías. Habiéndose obtenido así los valores de l' para los multipletes de la configuración, los números cuánticos l de la configuración, se identifican utilizando la segunda de las ecuaciones (10-14) (o utilizando una extensión obvia de la ecuación, en el caso que se sepa que existen más de los electrones ópticamente activos ya que algunos de los valores de s' son mayores que 1). La identificación de los números cuánticos n asociados con los diversos números cuánticos l no es difícil, si se conocen los números cuánticos n de la configuración del estado base, utilizando el hecho de que la energía de las subcapas con valores comunes de l aumentan en forma monótona conforme aumenta n. La identificación de los números cuánticos n de la configuración del estado base de los átomos, se basa en ese mismo hecho. ◀

10.5 Niveles de energía del átomo de carbono

En esta sección se considerará el diagrama de niveles de energía del átomo de ^{6}C que se muestra en la figura 10-8, como un ejemplo más del acoplamiento LS. El estado base de este átomo tiene la configuración $1s^2 2s^2 2p^2$, de modo que hay dos electrones p que son ópticamente activos. El cero en la escala de energías del diagrama se define de tal manera que la magnitud de la energía total del átomo en su estado base es igual a la energía requerida para ionizar el átomo una vez. En consecuencia, el diagrama es directamente comparable con los diagramas de niveles de energía para átomos alcalinos y ^{1}H, en los que el cero de energía se define de la misma forma. Los niveles de energía se denotan por la configuración de los dos electrones ópticamente activos y por los símbolos espectroscópicos que especifican s', l', j'.

Considérese primero la energía *promedio* de los niveles de las diversas configuraciones. En la configuración de más baja energía, $2p^2$, ambos electrones permanecen en la misma subcapa que ocupan en el estado base del átomo. En otras configuraciones, un electrón permanece en esa subcapa mientras que el otro pasa a la subcapa de mayor energía. Obsérvese que las energías promedio de las configuraciones dependen de los números cuánticos n y l del electrón en la subcapa de mayor energía, esencialmente de la misma forma como si este electrón fuera el único electrón ópticamente activo de un átomo alcalino.

En la configuración $2p^2$ la de energía más baja, los estados $^3P_{0,1,2}$ son de menor energía que los estados $^1S_0$ y $^1D_2$ ya que corresponden a un valor mayor de s', y los estados $^1D_2$ son de menor energía que el estado $^1S_0$ porque corresponden a un valor mayor de l'. Obsérvese que la

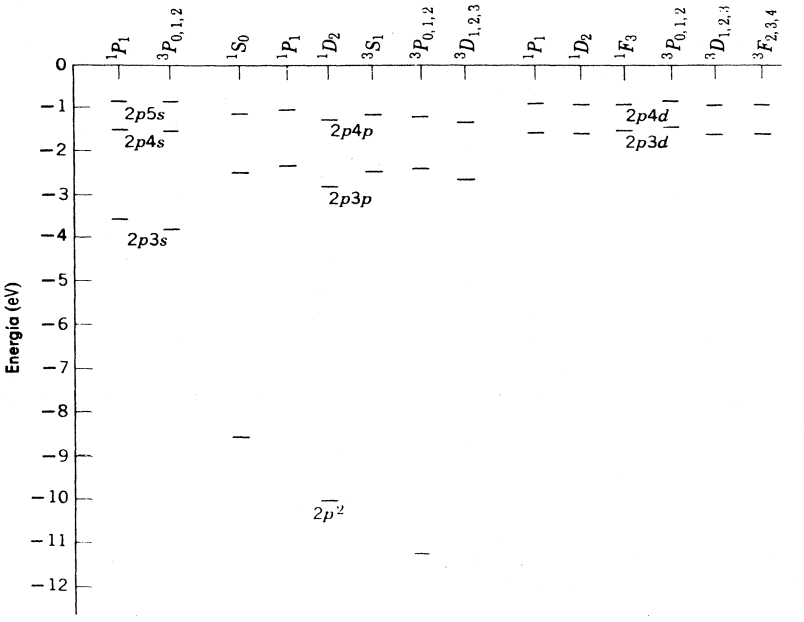


FIGURA 10-8
Algunos niveles de energía del átomo de carbón.

dependencia en s' es más fuerte que la dependencia en l'. Casi siempre, se encuentra que la energía asociada con el acoplamiento del impulso angular de spin debido a la interacción residual de Coulomb, es algo mayor que la energía asociada con el acoplamiento del impulso angular orbital debido a la interacción residual de Coulomb. De los tres niveles de energía muy juntos correspondientes a los estados $^3P_{0,1,2}$ que se resolverían en un diagrama más grande, el correspondiente al estado $^3P_0$ es el de más baja energía, ya que corresponde al valor más pequeño de j'. Por lo tanto, el estado base del átomo es el estado $2p^2\ ^3P_0$. Es decir, en el estado base del carbono existen dos electrones en la tercera subcapa parcialmente llena (la subcapa $2p$), que se acoplan de modo que tengan una unidad de impulso angular de spin total, una unidad de impulso angular orbital total e impulso angular total cero. El estudio de los estados excitados de baja energía de los átomos, conduce a una descripción extremadamente completa de sus estados base.

En la configuración $2p3s$ del ^{6}C, el nivel correspondiente a s' máxima es de menor energía, del mismo modo como en la configuración $2p^2$. En configuraciones de mayor energía promedio se observan desviaciones a esta regla y a la regla que para l' máxima se obtiene la menor energía, pero en ^{6}C no hay desviaciones de la regla de que para la j' mínima se obtiene la mínima energía.

En la figura 10-8 no se muestran algunos de los niveles de energía de la configuración $2s\ 2p^3$, que usualmente no están excitados. Asimismo no se muestra el desdoblamiento por interacción spin-órbita de los niveles de energía, ya que es demasiado pequeño para que pueda apreciarse en la escala del diagrama.

Aunque no se presenta en ^{6}C, en muchos átomos hay un *desdoblamiento hiperfino* de los niveles de energía, puesto que es menor que el desdoblamiento spin-órbita por tres órdenes de magnitud. Las causas del desdoblamiento hiperfino pueden cualquiera de los siguientes o

ambas: (1) *la interacción entre un momento dipolar magnético intrínseco del núcleo*, y un campo magnético producido por los electrones atómicos, y/o (2) la interacción entre una *distribución de carga nuclear no esféricamente simétrica* y un campo eléctrico no esféricamente simétrico producido por los electrones atómicos. Estos efectos son interesantes, principalmente porque proporcionan información útil respecto al núcleo y serán estudiados en el capítulo 15.

Obsérvese que en el diagrama de niveles de energía del ^{6}C de la figura 10-8 faltan los niveles correspondientes a los estados $^1P_1$ y $^3S_1$ en la configuración $2p^2$. Este es un efecto del *principio de exclusión*. En todas las demás configuraciones del diagrama, el principio de exclusión se satisface automáticamente por el hecho de que difieren los números cuánticos n de los electrones ópticamente activos. Pero en la configuración $2p^2$ ambos números cuánticos n y l son iguales, de modo que el principio de exclusión impone restricciones en los valores posibles de los demás números cuánticos. En la aproximación de Hartree, estos son conjuntos de los números cuánticos m_l, y m_s, en conjunto para cada uno de los electrones ópticamente activos *independientes* que tienen valores comunes de los números cuánticos n y l. Desde este punto de vista, las restricciones del principio de exclusión son simplemente que ningún par de electrones puede tener el mismo conjunto de los cuatro números cuánticos. En el acoplamiento LS donde la m_l y m_s no son útiles, y en su lugar se utilizan los números cuánticos l', s', j', m_j' para especificar la forma como interactúan los electrones ópticamente activos, las restricciones del principio de exclusión son más complicadas. Para el caso más general, los argumentos que se utilizan para obtener las restricciones del *principio de exclusión en el acoplamiento LS* son muy complicadas, y aún en situaciones especiales más simples son un tanto complicadas. (Los lectores interesados en esto encontrarán una muestra de estos argumentos y una afirmación completa de sus conclusiones en el apéndice K). Aquí solo se mencionarán dos conclusiones que se obtienen de los argumentos. Una de éllas es que faltan los estados $^1P_1$ y $^3S_1$ en la configuración $2p^2$ y que faltan otros estados en otras configuraciones en las que los electrones tienen los números cuánticos n y l iguales, que se pueden entender en base al principio de exclusión. Otra conclusión es que cuando hay tantos electrones con iguales números cuánticos n y l como los permite el principio de exclusión, el único estado que puede ocurrir es el $^1S_0$. Esta restricción puede expresarse diciendo que *cuando una subcapa se encuentra completamente llena, el único estado permitido es aquel para el que el impulso angular de spin total, el impulso angular orbital total y el impulso angular total son todos cero.* Una consecuencia de que no haya impulsos angulares totales en una subcapa completamente llena es que no tiene un momento dipolar magnético neto. Por lo tanto, solo aquellos pocos electrones de un átomo que no se encuentran en subcapas llenas, son los involucrados en la interacción con campos magnéticos externos, una simplificación importante.

Esta restricción particular del principio de exclusión aplicado al acoplamiento LS es exactamente lo que se esperaría al aplicar el principio de exclusión a la aproximación de Hartree. Para mostrar que ésto es así, supóngase que los electrones en una subcapa completamente llena, no interactúan entre sí. Entonces, el comportamiento de cada uno se puede describir por medio de los números cuánticos m_l y m_s. Como la subcapa está llena, los electrones tendrán todas las posibles combinaciones de m_l y m_s, pero como todos los electrones tienen la misma n y l, cada combinación de m_l y m_s solo ocurrirá una vez. El resultado es que para cada electrón que tenga cierta componente z positiva del impulso angular orbital (ya que tiene cierta m_l positiva), habrá un electrón que tenga la correspondiente componente z negativa (ya que tendrá la correspondiente m_l negativa). Por lo tanto, el impulso angular orbital total de los electrones en la subcapa llena, sumarán cero. Lo mismo será válido para el impulso angular de spin total. Por lo tanto, su impulso angular total también tendría que ser cero.

El espectro óptico de líneas del átomo ^{6}C, o de cualquier otro átomo que presente acoplamiento LS puede construirse a partir de su diagrama de niveles de energía, evaluando la energía y frecuencia de los fotones en todas las transiciones posibles que no violan las siguientes *reglas de selección de acoplamiento LS:*

1. Sólo pueden ocurrir transiciones entre configuraciones para las que son diferentes los números cuánticos n y l de *un solo* electrón. Esto quiere decir que dos o más electrones no

pueden efectuar transiciones entre subcapas simultáneamente.

2. Sólo pueden ocurrir transiciones entre configuraciones para las que el cambio en el número cuántico l del electrón satisface la misma restricción que se aplica a átomos con un solo electrón, (8-37)

$$\Delta l = \pm 1$$

3. Sólo pueden ocurrir transiciones entre estados de aquellas configuraciones para las cuales los cambios en los números cuánticos s', l', j' satisfacen las restricciones

$$\begin{aligned} &\Delta s' = 0 \\ &\Delta l' = 0, \pm 1 \\ &\Delta j' = 0, \pm 1 \quad \text{(pero no de } j' = 0 \text{ a } j' = 0) \end{aligned} \tag{10-17}$$

La primera de (10-17) prohibe transiciones entre estados de singulete ($s' = 0$) triplete ($s' = 1$) y viceversa. Sin embargo, se observan transiciones entre los estados $2p^2\ {}^1D_2$ y $2p^2\ {}^3P_{0,1,2}$ del ^{6}C. La razón es que todas las excitaciones de ese átomo a estados de singulete, eventualmente conducen a la población de sus estados $2p^2\ {}^1D_2$ ya que en la figura 10-8 aparecen como los estados singulete de menor energía. Cuando el número total de transiciones por segundo a los estados $2p^2\ {}^3P_{0,1,2}$ se encuentran altamente poblados, se vuelven apreciables, a pesar de que la probabilidad de que un solo átomo lleve a cabo esta transición, es muy pequeña ya que viola la regla de selección $\Delta s' = 0$. Físicamente, esta regla quiere decir que si el acoplamiento de los spin electrónicos cambia en una transición atómica, el átomo no puede emitir radiación del tipo de la producida por momentos *dipolares eléctricos* oscilantes. Si el acoplamiento del spin cambia, se emite radiación pero a un ritmo muy bajo. La radiación se produce ineficientemente por *momentos dipolares magnéticos de spin* oscilantes, asociados con los cambios en el acoplamiento del spin. Las últimas dos reglas de selección de (10-17) son similares a las de (8-37) y (8-38).

10.6 El efecto Zeeman

En 1896, Zeeman observó que cuando un átomo se coloca en un campo magnético *externo* y se excita, las líneas espectrales que emite en el proceso de desexcitación se desdoblan en varias componentes. En la figura 10-9 se ilustran algunos ejemplos del *efecto Zeeman*. Para campos

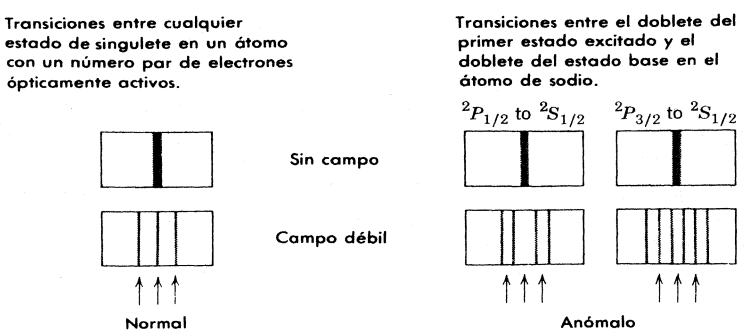


FIGURA 10-9
Representación de placas fotográficas que muestran el desdoblamiento de varias líneas espectrales en el efecto Zeeman normal y anómalo. Las flechas muestran los desdoblamientos predichos por la teoría clásica de Lorentz.

menores a varias décimas de tesla, el desdoblamiento es proporcional a la intensidad del campo. Para estos campos, el desdoblamiento Zeeman es menor que el desdoblamiento de la estructura fina, que es proporcional a la intensidad de los campos internos más fuertes del átomo. Obviamente, el efecto Zeeman indica que los niveles de energía del átomo, se desdoblan en varias componentes bajo la presencia de un campo magnético externo. En ciertos casos especiales, que se les llamó "*normales*", estos desdoblamientos de los niveles de energía podían entenderse en términos de una teoría clásica desarrollada por Lorentz. Pero en casos generales, que se les llamó "*anómalos*", no era posible ni siquiera una explicación cualitativa de los desdoblamientos observados hasta que se desarrolló la mecánica cuántica y se introdujo el concepto de spin.

En términos de la teoría moderna, ambos desdoblamientos Zeeman, normal y anómalo se entienden fácilmente. Debido a los movimientos dipolares magnéticos de spin y orbital $\boldsymbol{\mu}_s$, y $\boldsymbol{\mu}_l$ de los electrones ópticamente activos, un átomo tendrá un *momento dipolar magnético total*, $\boldsymbol{\mu}$, excepto cuando se encuentre en un estado $^1S_0$. (Los otros electrones se encuentran en subcapas completamente llenas que no tienen momentos dipolares magnéticos netos). Cuando este momento dipolar magnético del átomo se encuentra en un campo magnético externo **B** tendrá la energía potencial usual de orientación.

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \tag{10-18}$$

Cada uno de los niveles de energía del átomo se desdoblará en varias componentes discretas correspondientes a los diversos valores ΔE asociados con las diferentes orientaciones *cuantizadas de* $\boldsymbol{\mu}$ respecto a la dirección de **B**. En otras palabras, debido a que posee un momento dipolar magnético, la energía del átomo depende de cual de las orientaciones posibles asuma en el campo magnético externo.

Para ilustrar cualitativamente lo que está detrás de la distinción entre desdoblamientos normal y anómalo, se calcula $\boldsymbol{\mu}$ utilizando (8-9) y (8-19) para obtener $\boldsymbol{\mu}_l$ y $\boldsymbol{\mu}_s$ para cada electrón ópticamente activo, en términos de sus impulsos angulares de spin y orbital, y después sumando todos estos electrones. Es decir, se toma

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu} &= -\frac{g_l \mu_b}{\hbar}\mathbf{L}_1 - \frac{g_l \mu_b}{\hbar}\mathbf{L}_2 - \cdots \\ &\quad -\frac{g_s \mu_b}{\hbar}\mathbf{S}_1 - \frac{g_s \mu_b}{\hbar}\mathbf{S}_2 - \cdots \\ &= -\frac{\mu_b}{\hbar}[(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \cdots) + 2(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \cdots)]\end{aligned}$$

Se han introducido los valores $g_l = 1$ y $g_s = 2$ para los factores g orbital y de spin que determinan las razones de momentos dipolares magnéticos a impulsos angulares. Ahora bien, si el átomo obedece el acoplamiento LS los impulsos angulares orbitales se acoplan para dar el impulso angular orbital total $\mathbf{L}'$ y los impulsos angulares de spin individuales se acoplan para dar el impulso angular de spin total $\mathbf{S}'$. Entonces, la expresión para el momento dipolar magnético total del átomo, se simplifica inmediatamente para dar

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\mu_b}{\hbar}[\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}'] \tag{10-19}$$

Se puede ver que el momento dipolar magnético total del átomo no es antiparalelo a su *impulso angular total*

$$\mathbf{J}' = \mathbf{L}' + \mathbf{S}' \tag{10-20}$$

La razón básica es que los factores g orbital y de spin tienen diferentes valores. El resultado es que el comportamiento de $\boldsymbol{\mu}$ es bastante complicado, ya que su orientación no se relaciona de modo simple con la orientación de $\mathbf{J}'$. Pero si $\mathbf{S}' = 0$, es decir, los impulsos angulares de spin de los electrones ópticamente activos se acoplan a cero, entonces $\boldsymbol{\mu}$ es antiparalela a $\mathbf{J}'$ y el comportamiento de $\boldsymbol{\mu}$ y, por lo tanto, del término $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ que produce los desdoblamientos de los niveles de energía, es más simple. De hecho, en este caso, donde no está implicado el efecto no clásico del spin, el comportamiento de $\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ se puede explicar satisfactoriamente por la antigua teoría de Lorentz. Este caso corresponde al desdoblamiento normal de Zeeman. En el caso más general; $\mathbf{S}' \neq 0$ y la teoría de Lorentz falla. Este caso corresponde al desdoblamiento anómalo de Zeeman. Esta terminología se introdujo mucho antes de que la teoría cuántica proporcionara un entendimiento completo de todos los aspectos de los desdoblamientos Zeeman y, desde el punto de vista moderno, ya no es muy apropiada puesto que no hay nada anómalo en ninguno de los desdoblamientos. Es interesante hacer notar que los desdoblamientos anómalos pudieron haber sido utilizados en fechas muy anteriores para demostrar la existencia del spin y para demostrar que el factor g del spin difiere del factor orbital.

Enseguida, se evaluarán cuantitativamente los desdoblamientos Zeeman para niveles de energía típicos de átomos con acoplamiento LS aplicando lo que se ha aprendido acerca del comportamiento de los diversos vectores de impulso angular en dichos átomos. De (10-20) se puede ver que $\mathbf{L}'$, $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{J}'$ siempre se encuentran en un plano común. Pero ese plano precede respecto a $\mathbf{J}'$ debido a la precesión de Larmor de $\mathbf{S}'$ en el campo magnético interno del átomo asociado con $\mathbf{L}'$ (es decir, debido a la interacción spin-órbita). La ecuación (8-14) demuestra que esta frecuencia de precesión es proporcional a la intensidad del campo magnético interno del átomo. De (10-19) se puede ver que $\boldsymbol{\mu}$ se encuentra en el plano de precesión y típicamente no es antiparalelo a $\mathbf{J}'$, de modo que $\boldsymbol{\mu}$ también debe preceder respecto a $\mathbf{J}'$ con una frecuencia de precesión proporcional a su intensidad. Si el campo externo es débil comparado con el campo atómico, la precesión de $\boldsymbol{\mu}$ respecto a $\mathbf{B}$ será lenta comparada con su precesión respecto a $\mathbf{J}'$. Por lo tanto, el movimiento de $\boldsymbol{\mu}$ es algo parecido a lo que se ilustra en la figura (10-10). Aún en el caso de un campo externo relativamente débil, el movimiento de $\boldsymbol{\mu}$ es complicado, pero no tan complicado que impida evaluar la energía potencial de orientación ΔE.

En el ejemplo 8-4 se vio que la intensidad de un campo magnético interno que actúa sobre un electrón ópticamente activo es típicamente del orden de un tesla. Por lo tanto, se supone que el campo magnético externo es débil comparado con un tesla. Para calcular la energía potencial de orientación ΔE de $\boldsymbol{\mu}$ en el campo $\mathbf{B}$, debe evaluarse $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_{\mathbf{B}} B$, donde $\mu_{\mathbf{B}}$ es la componente de $\boldsymbol{\mu}$ en la dirección de $\mathbf{B}$. Como $\boldsymbol{\mu}$ precede mucho más rápidamente en torno a $\mathbf{J}'$ que en torno a $\mathbf{B}$, se puede evaluar $\mu_{\mathbf{B}}$ encontrando primero $\mu_{\mathbf{J}'}$, que es la componente promedio de $\boldsymbol{\mu}$ en la dirección $\mathbf{J}'$.

Esto se realiza multiplicando μ por el coseno del ángulo entre $\boldsymbol{\mu}$ y $\mathbf{J}'$. Después se encuentra $\mu_{\mathbf{B}}$ multiplicando $\mu_{\mathbf{J}'}$ por el coseno del ángulo entre $\mathbf{J}'$ y $\mathbf{B}$. Es decir,

$$\mu_{\mathbf{J}'} = \mu \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J}'}{\mu J'} = -\frac{\mu_b}{\hbar} \frac{(\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}') \cdot (\mathbf{L}' + \mathbf{S}')}{J'}$$

y

$$\mu_{\mathbf{B}} = \mu_{\mathbf{J}'} \frac{\mathbf{J}' \cdot \mathbf{B}}{J'B} = \mu_{\mathbf{J}'} \frac{J'_z}{J'} = -\frac{\mu_b}{\hbar} \frac{(\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}') \cdot (\mathbf{L}' + \mathbf{S}') J'_z}{J'^2}$$

en donde se ha escogido que el eje z esté en la dirección de $\mathbf{B}$ evaluando el producto escalar, se obtiene

$$\mu_{\mathbf{B}} = -\frac{\mu_b}{\hbar} (L'^2 + 2S'^2 + 3\mathbf{L}' \cdot \mathbf{S}') \frac{J'_z}{J'^2}$$

Escribiendo (8-34) con primas, se obtiene

$$3\mathbf{L}' \cdot \mathbf{S}' = 3(J'^2 - L'^2 - S'^2)/2$$

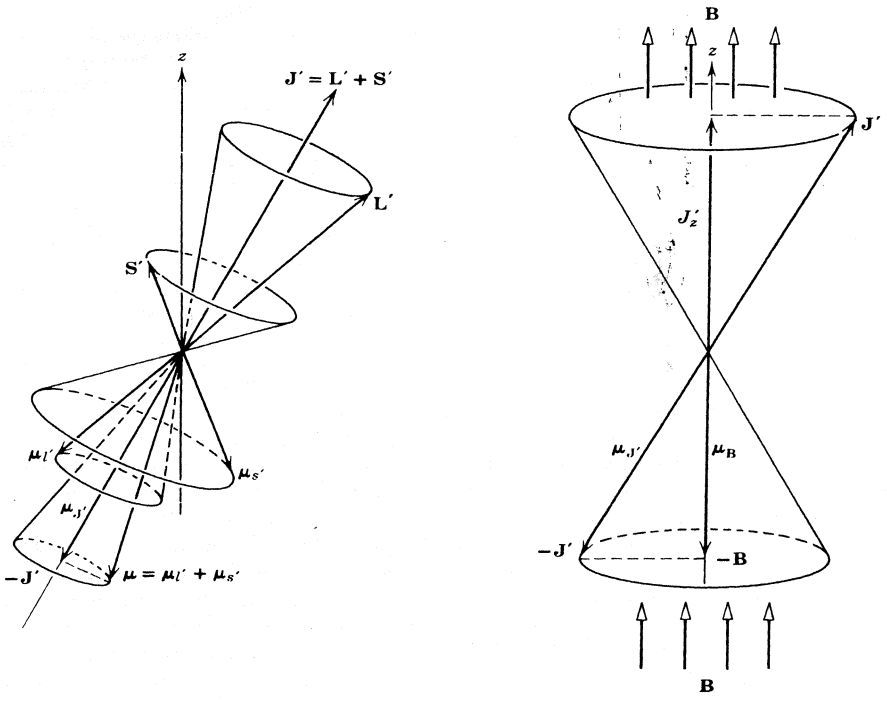


FIGURA 10-10

Izquierda: El impulso angular orbital total $\mathbf{L}'$ y el spin total $\mathbf{S}'$ se acoplan para formar el impulso angular total $\mathbf{J}'$ de un átomo típico. Similarmente, el momento dipolar magnético orbital total $\boldsymbol{\mu}_{l'}$ y el momento dipolar magnético de spin total $\boldsymbol{\mu}_{s'}$ se acoplan para formar el momento dipolar magnético total $\boldsymbol{\mu}$. Como la constante de proporcionalidad que conecta $\mathbf{L}'$ con $\boldsymbol{\mu}_{l'}$ es solo la mitad de la magnitud de la constante que conecta a $\mathbf{S}'$ con $\boldsymbol{\mu}_{s'}$, el momento dipolar total no será exactamente antiparalelo a $\mathbf{J}'$. Como $\mathbf{L}'$ y $\mathbf{S}'$ preceden rápidamente en torno a $\mathbf{J}'$, $\boldsymbol{\mu}_{l'}$ y $\boldsymbol{\mu}_{s'}$ también preceden rápidamente, causando que $\boldsymbol{\mu}$ preceda respecto a $-\mathbf{J}'$ a la misma velocidad. Por lo tanto, la componente de $\boldsymbol{\mu}$ perpendicular a $-\mathbf{J}'$ en promedio es cero, y la componente paralela a $-\mathbf{J}'$ permanece constante con magnitud $\mu_{J'}$. *Derecha:* En un campo magnético aplicado débil $\mathbf{B}$, se produce un impulso rotativo que ocasiona que la dirección $-\mathbf{J}'$ sobre la cual $\boldsymbol{\mu}$ tiene una componente promedio constante, de magnitud $\mu_{J'}$, preceda en torno a la dirección de $-\mathbf{B}$. Por lo tanto, la magnitud promedio de esta componente en la dirección del campo tiene la magnitud $\mu_{\mathbf{B}}$ que se indica en la figura.

De esta manera,

$$\mu_{\mathbf{B}} = -\frac{\mu_b}{\hbar}[L'^2 + 2S'^2 + 3(J'^2 - L'^2 - S'^2)/2]\frac{J'_z}{J'^2}$$

$$= -\frac{\mu_b}{\hbar}\frac{(3J'^2 + S'^2 - L'^2)}{2J'^2}J'_z$$

Entonces, de acuerdo con (10-18)

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_{\mathbf{B}} B$$

la energía potencial de orientación es:

$$\Delta E = \frac{\mu_b B}{\hbar} \frac{(3J'^2 + S'^2 - L'^2)}{2J'^2} J'_z \tag{10-21}$$

En el estado especificado por los números cuánticos s', l', j', m'_j las cantidades dinámicas S'^2, L'^2, J'^2, J'_z tienen precisamente los valores $s'(s' + 1)\hbar^2$, $l'(l' + 1)\hbar^2$, $j'(j' + 1)\hbar^2$, $m'_j \hbar$, respectivamente. Sustituyendo estos valores por (10-21), se obtiene una expresión para la energía de desdoblamiento del efecto Zeeman, que por ser más conveniente se escribe como

$$\Delta E = \mu_b B g m'_j \tag{10-22}$$

donde

$$g = 1 + \frac{j'(j' + 1) + s'(s' + 1) - l'(l' + 1)}{2j'(j' + 1)} \tag{10-23}$$

La cantidad g es llamada *factor g de Landé*. Nótese que su valor $g = 1 = g_l$, donde $s' = 0$ de modo que $j' = l'$. Su valor es $g = 2 = g_s$, cuando $l' = 0$ de modo que $j' = s'$. Estos son los valores que se esperarían ya que si $s' = 0$, el impulso angular es puramente orbital, y si $l' = 0$, es puramente de spin. Por lo tanto, el factor g de Landé es una especie de factor g variable que determina la relación entre el momento dipolar magnético total y el impulso angular total en estados donde ese impulso angular es parcialmente de spin y parcialmente orbital. De (10-22) se puede ver que en un campo magnético externo de intensidad B cada nivel de energía se desdoblará en $2j' + 1$ componentes, una para cada valor de m'_j. También se puede ver que la magnitud del desdoblamiento será diferente para niveles con factores de Landé g diferentes.

Ejemplo 10-5. Calcular el factor de Landé g para el nivel $^3P_1$ en la configuración $2p\,3s$ del átomo ^{6}C y utiliza el resultado para predecir el desdoblamiento del nivel cuando el átomo se encuentra en un campo magnético externo de 0.1 tesla.

Para el estado $^3P_1$, $s' = l' = j' = 1$. Por lo tanto,

$$g = 1 + \frac{1(1 + 1) + 1(1 + 1) - 1(1 + 1)}{2 \times 1(1 + 1)} = 1 + \frac{2}{2 \times 2} = \frac{3}{2}$$

Para $j' = 1$, los valores posibles de m'_j son 1, 0, 1, de modo que el nivel se desdobla en tres componentes, una con la misma energía, y las otras desplazadas en energía por:

$$\begin{aligned} \Delta E = \mu_b B g m'_j &= \pm \mu_b B g = \pm 9.3 \times 10^{-24} \quad \text{A-m}^2 \times 10^{-1} \text{ tesla} \times 1.5 \\ &= \pm 1.4 \times 10^{-24} \text{ joule} \\ &= \pm 8.7 \times 10^{-6} \text{ eV} \end{aligned}$$

◀

En la figura 10-11 se muestra, a escala, los desdoblamientos del nivel de energía del estado base $^2S_{1/2}$ y de los niveles de energía de los estados excitados de más baja energía del ^{11}Na, $^2P_{1/2}$ y $^2P_{3/2}$ cuando se coloca en un campo magnético externo débil. Obsérvese como el campo magnético externo elimina el último vestigio de degeneración de los niveles, ya que la energía depende de m'_j. La figura también muestra las transiciones permitidas por las *reglas de selección* para m'_j:

$$\Delta m'_j = 0, \pm 1 \text{ (pero no } m'_j = 0 \text{ hacia } m'_j = 0 \text{ si } \Delta j' = 0) \tag{10-24}$$

Esta regla de selección está estrechamente relacionada con la que se derivó en el ejemplo 8-6. Aún con sus restricciones en las transiciones permitidas, el efcto Zeeman desdobla cada línea espectral emitida por el átomo, en un patrón que generalmente contiene cierto número de componentes. El estudiante deberá comparar las transiciones permitidas, señaladas con flechas

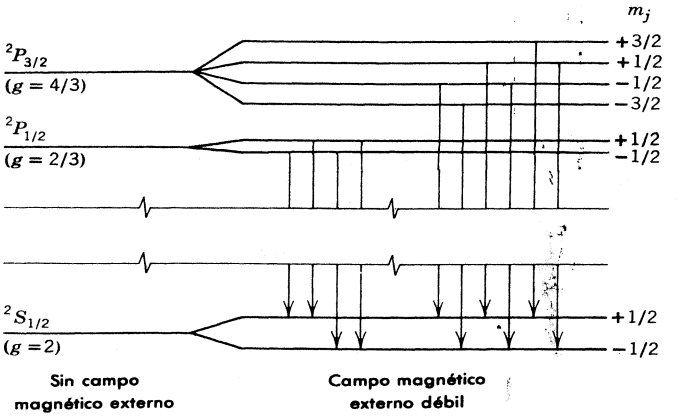


FIGURA 10-11
Desdoblamiento Zeeman de los primeros estados excitados del sodio, $^2P_{1/2,3/2}$ y de su estado base $^2S_{1/2}$. Se muestran las transiciones permitidas por las reglas de selección. Comparar las líneas espectrales resultantes con las que se muestran en la figura 10-9.

en la figura 10-11, con el patrón de líneas anómalo emitido por el ^{11}Na en estas transiciones, que se muestra en la figura 10-9.

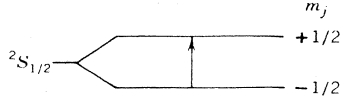
Todas las líneas espectrales que resultan de transiciones entre estados de singulete, se desdoblan en un patrón simple de dos componentes dispuestas simétricamente respecto a una tercera componente que tiene la misma frecuencia que la línea de campo cero, como se puede ver en el patrón de líneas normal que se muestra en la figura 10-9. La razón es que $s' = 0$ para estados de singulete de modo que todos los factores g tienen el mismo valor $g = 1$. Es fácil demostrar que ésto conduce a líneas espectrales con solo tres componentes, construyendo un diagrama similar a la figura 10-11.

Ejemplo 10-6. La evidencia del desdoblamiento de los niveles de energía atómicos, en un campo magnético externo, más fácil de interpretar, es la *resonancia del spin electrónico*. Si se colocan átomos de ^{11}Na, en su estado base, en una región que contenga radiación electromagnética de frecuencia ν, y un campo magnético de intensidad B aplicado en esta región, ocurrirá una fuerte absorción de energía electromagnética, cuando la energía de los fotones, $h\nu$, sea justamente igual al desdoblamiento Zeeman de las dos componentes del nivel de energía del estado base. La razón es que estos fotones son capaces de inducir transiciones entre las componentes, indicadas en la figura 10-12, en las que se absorben. En un experimento típico $\nu = 1.0 \times 10^{10}$ Hz. Determinar el valor de B para el cual la frecuencia definida por el desdoblamiento Zeeman está en resonancia con esta frecuencia de microondas.

El estado base del ^{11}Na es un estado $^2S_{1/2}$ para el cual $g = 2$ y $m_j' = \pm 1/2$. Por lo tanto, (10-22) predice que el desplazamiento en energía de las componentes del nivel del estado base en un campo externo B será

$$\Delta E = \mu_b B g m_j' = \mu_b B 2(\pm 1/2) = \pm \mu_b B$$

FIGURA 10-12
Ilustración de las transiciones que se observan en la resonancia del spin electrónico que involucran los niveles de energía del estado base del sodio desdobladas por un campo magnético externo.



Igualando $h\nu$ a la separación en energía entre las dos componentes, se tiene

$$h\nu = 2\mu_b B$$

de modo que:

$$B = \frac{h\nu}{2\mu_b} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 1.0 \times 10^{10}/\text{seg}}{2 \times 9.3 \times 10^{-24} \text{ A mp-m}^2} = 0.35 \text{ tesla}$$

Este efecto es ampliamente utilizado por los químicos, para medir los campos magnéticos que experimenta un electrón ópticamente activo en un átomo que forma parte de una molécula. La energía electromagnética la proporciona un oscilador de microondas, y la potencia que se obtiene del oscilador se registra al mismo tiempo, que se varía su frecuencia, hasta que se observa la condición de resonancia. ◀

El efecto Zeeman constituye una espectroscopía experimental muy útil, analizando los desdoblamientos Zeeman de las líneas espectrales de un átomo, el espectroscopista puede determinar los desdoblamientos de los niveles de energía del átomo. Esto puede confirmar en forma determinante, la asignación del número cuántico j' de cada nivel, ya que $2j' + 1$ es igual al número de componentes en que se desdobla cada nivel. Además, la magnitud del desdoblamiento entre cualesquiera dos componentes tiene el valor de $\mu_b Bg$, y como μ_b y B son conocidos, de aquí se puede obtener el valor de g para el nivel de energía. Como el valor de g depende de s', l', j', si el átomo obedece el acoplamiento *LS*, también puede utilizarse para confirmar la asignación de s' y l'. Por lo general, la asignación inicial de los valores de los tres números cuánticos, proviene de la aplicación de la regla del intervalo de Landé para medir la separación de los niveles de un multiplete, como en el ejemplo 10-4.

Un campo magnético externo **B** que sea débil comparado con los campos magnéticos internos de los átomos que acoplan **S**′ y **L**′ para formar **J**′, no puede perturbar este acoplamiento y solo ocasiona una precesión relativamente lenta de **J**′, en torno a la dirección **B**. Sin embargo, si **B** es más fuerte que el campo magnético atómico, se sobrepone al campo y destruye el acoplamiento de **S**′ con **L**′. En este caso, **S**′ y **L**′ preceden independientemente en torno a la dirección de **B**. Este es el caso del *efecto Paschen-Bach* que se observa para campos externos, algo mayores que 1 tesla. Si el átomo obedece el acoplamiento *LS* su momento dipolar magnético total es dado aún por (10-19)

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\mu_b}{\hbar}[\mathbf{L}' + 2\mathbf{S}']$$

ya que un campo magnético tal como ese, no destruye el acoplamiento de los impulsos angulares de spin individuales, para formar **S**′, ni el acoplamiento de los impulsos angulares orbitales individuales para formar **L**′. Sin embargo, en este caso $\mu_{\mathbf{B}}$ es simplemente

$$\mu_{\mathbf{B}} = -\frac{\mu_b}{\hbar}(L_z' + 2S_z')$$

donde se ha escogido el eje z en la dirección de **B**. Entonces,

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_{\mathbf{B}} B = \frac{\mu_b B}{\hbar}(L_z' + 2S_z')$$

y se obtiene inmediatamente:

$$\Delta E = \mu_b B(m_l' + 2m_s') \tag{10-25}$$

Los números cuánticos m_l' y m_s' resultan útiles para un átomo en un campo magnético externo un tanto más intenso que el campo magnético interno, ya que L_z' y S_z' tienen valores fijos en

estas circunstancias. Se observa que las *reglas de selección* para los dos números cuánticos son:

$$\Delta m_s' = 0 \tag{10-26}$$

$$\Delta m_l' = 0, \pm 1 \tag{10-27}$$

La primera regla de selección afirma que el impulso angular de spin total y el momento dipolar magnético, no cambian de orientación en una transición atómica. Como esas transiciones implican la emisión de radiación de dipolo eléctrico, mientras que un momento dipolar magnético de orientación variable conduciría a la emisión de radiación de dipolo magnético, el origen de las reglas de selección es obvio. La segunda regla de selección se derivó en el ejemplo 8-6. Todas las líneas espectrales se desdoblan por el efecto Paschen-Bach en tres componentes, igual que en el efecto Zeeman normal.

10.7 Resumen

Este capítulo se resume en la tabla 10-3, que enlista, en orden decreciente de importancia en la determinación de la energía, todas las interacciones significativas que experimenta un electrón ópticamente activo en un átomo multielectrónico típico que se coloca en un campo magnético externo débil. Por típico se quiere decir, un átomo con una subcapa externa un poco menos que semillena, cuyo número atómico Z es suficientemente bajo para que esté sujeto al acoplamiento LS. Si Z es muy alta, el átomo obedece acoplamiento JJ y la más importante interacción más débil es la interacción spin-órbita. Si el campo magnético externo es más intenso que el campo magnético interno, la interacción que se produce es llamada interacción Paschen-Bach, y es más importante que la interacción spin-órbita en el acoplamiento LS. Campos eléctricos externos tienen efectos similares a campos magnéticos externos pero un pocos más complicados.

TABLA 10-3. Interacciones en un átomo típico (acoplamiento *LS*; subcapa un poco menos que semillena) colocado en un campo magnético externo débil.

Importancia en la determinación de la energía	Nombre	Naturaleza de la interacción	Números cuánticos que determinan la energía	Energía más baja para
Interacción dominante	Hartree	Eléctrica; potencial promedio	un conjunto de n, l	n Mínima l Mínima
Interacción débil más importante	Residual-de Colomb acoplamiento de spin	Eléctrica; desviaciones del potencial promedio	s'	s' Máxima
Ligeramente menos importante	Residual de Colomb; acoplamiento orbital	Eléctrica; desviaciones del potencial promedio	l'	l' Máxima
Apreciablemente menos importante	Spin-órbita	Magnética campo interno	j'	j' Mínima
Menos importante	Zeeman	Magnético; campo externo	m_j'	Más negativa m_j'

Si los electrones ópticamente activos se encuentran en una subcapa más que semillena, se cambia el signo de la interacción spin-órbita, ya que el átomo actúa como si tuviera agujeros cargados positivamente en lugar de electrones cargados negativamente, lo cual cambia la orientación relativa de los vectores correspondientes al momento dipolar magnético e impulso angular. El resultado es que el nivel de energía más bajo es el de j' máxima en lugar de ser el de j' mínima. Sin embargo, aún en dichos átomos el nivel de energía más bajo está dado por s' y l' máximas, ya que el signo de la interacción residual de Coulomb no cambia; es tan repulsiva entre agujeros positivos, como lo es entre electrones negativos.

PREGUNTAS

1. Dar un ejemplo de un sistema que se estudie en ciencia o ingeniería, que no sea el átomo multielectrónico, cuyo mejor tratamiento es una sucesión de aproximaciones en orden creciente de exactitud.

2. ¿Por qué los astrónomos dependen tanto de la información que se obtiene de los espectros ópticos?

3. ¿Por qué no es posible dar una pequeña cantidad de energía a un electrón en una subcapa interna de un átomo? ¿Qué sucede si se le suministra una gran cantidad de energía a un electrón en una subcapa externa?

4. ¿Donde se encuentra, en la aproximación de Hartree, la suposición de que el potencial neto es esféricamente simétrico?

5. Explicar, en términos sencillos, porqué la interacción spin-órbita se vuelve más fuerte a medida que Z aumenta.

6. Los átomos de Z grande, ¿tienen más electrones ópticamente activos que los átomos de Z pequeña?

7. Los químicos generalmente hablan de electrones de valencia. ¿Cuál es el término correspondiente usualmente empleado por los físicos?

8. Al estudiar la interacción residual de Coulomb, se utilizan eigenfunciones que son antisimétricas respecto al intercambio de marcas de pares de electrones ópticamente activos. ¿Cómo se justifica el hecho de que no se utilicen eigenfunciones que sean antisimétricas con respecto al intercambio de marcas de cualquier par de electrones en el átomo?

9. En el acoplamiento del impulso angular de spin de un electrón ópticamente activo de un átomo típico, con el impulso angular de spin de otro electrón ópticamente activo, ¿está implicada una interacción magnética entre sus momentos dipolares magnéticos de spin? En caso negativo, explicar porqué no, y explicar también, en términos sencillos, a que se debe el acoplamiento.

10. Explicar el origen físico del acoplamiento entre los impulsos angulares orbitales de los electrones ópticamente activos en un átomo típico.

11. ¿Por qué hay una explicación clásica para el acoplamiento de los impulsos angulares orbitales de los electrones ópticamente activos, y no la hay para el acoplamiento de sus impulsos angulares de spin?

12. En un multiplete con $s' > l'$, ¿en cuántas componentes se desdoblan los niveles por la interacción spin-órbita? Considérese el multiplete que se estudió en el ejemplo 10-4.

13. ¿Cuál es la diferencia entre acoplamiento LS y acoplamiento JJ ?

14. ¿Cuál es la relación entre los estados cuánticos permitidos por el principio de exclusión en el acoplamiento LS para una subcapa con un agujero (es decir, completamente llena excepto por un electrón) y los estados cuánticos permitidos en una subcapa con un electrón? ¿Habría una relación

sencilla entre las excitaciones ópticas de un átomo de halógeno y las excitaciones ópticas de un átomo alcalino?

15. ¿Cómo sería el principio de exclusión para acoplamiento *JJ* ?

16. ¿Sería posible que un factor g de Landé tenga un valor menor que 1? ¿Mayor que 2?

17. ¿Cuál sería el efecto de colocar a un átomo en un campo magnético externo de intensidad *mucho* mayor que la intensidad del campo magnético interno?

18. ¿Es posible eliminar la degeneración de los niveles de energía atómicos sin utilizar un campo magnético externo?

PROBLEMAS

1. (a) Trazar un diagrama de niveles de energía para el ^{11}Na, similar a la figura 10-1, que muestre todos los niveles de energía más baja que el nivel $5s$. (b) Diseñe un modo de indicar el desdoblamiento spin-órbita de los niveles. (Sugerencia: ver figura 10-8). (c) Indicar que transiciones entre estos niveles son permitidas por las reglas de selección.

2. (a) Predecir los valores de s', l', j' en el estado de energía *máxima* de dos electrones ópticamente activos con números cuánticos $l_1 = 1$, $s_1 = 1/2$; $l_2 = 2$, $s_2 = 1/2$. (b) Hacer un dibujo, similar a la figura 10-3, que muestre el movimiento de los vectores de impulso angular de este estado.

3. Encontrar los valores posibles de s', l', j' para una configuración con dos electrones ópticamente activos con números cuánticos $l_1 = 2, s_1 = 1/2; l_2 = 3, s_2 = 1/2$. Especificar que j' va con cada combinación de l' y s'

4. (a) Escribir los números cuánticos correspondientes a los estados descritos en notación espectroscópica como $^2S_{3/2}$, $^3D_2$, y $^5P_3$. (b) Determinar si algunos de estos estados son imposibles, y si es así, explicar por qué.

5. Hacer un dibujo, similar a la figura 10-6, que muestre los desdoblamientos de los niveles de energía por acoplamiento LS de una configuración $4s3d$. Utilizar la regla del intervalo de Landé para predecir las relaciones entre los desdoblamientos de estructura fina de cada multiplete, de modo que puedan dibujarse a escala. Marcar los niveles con notación espectroscópica.

6. (a) Utilizar la tabla periódica de la figura 9-13 para determinar las configuraciones del estado base para los átomos ^{12}Mg, ^{13}Al, y ^{14}Si. (b) Después, predecir los números cuánticos del acoplamiento LS para el estado base de cada átomo. Expresar el resultado en notación espectroscópica.

7. Utilizar los procedimientos del ejemplo 10-3 para verificar la predicción teórica de la tabla 10-2, para la prueba por la regla del intervalo de Landé, de la existencia de acoplamiento LS en la configuración $4s3d$ del átomo de ^{20}Ca.

8. En un átomo que obedece el acoplamiento LS, la separación entre los niveles de energía adyacentes de un multiplete particular de cinco niveles, está en las razones 1: 2: 3: 4. Utilizar el procedimiento del ejemplo 10-4, para asignarle los números cuánticos s', l', j' a estos niveles.

9. Considerar una subcapa d llena, es decir, que contenga los diez electrones permitidos por el principio de exclusión. Ignórense las interacciones entre los electrones, de modo que se puedan utilizar los números cuánticos n, l, m_l, m_s de la aproximación de Hartree, para describir cada electrón. (a) Demostrar que existe solo un estado cuántico posible del sistema, que satisface el principio de exclusión. (b) Demostrar que en este estado, las componentes z del impulso angular de spin total, del impulso angular orbital total y del impulso angular total, deben ser todas cero. (c) Dar argumentos que demuestren que estas conclusiones implican que las magnitudes del impulso angular de spin total, del impulso angular orbital total y del impulso angular total, son todas cero. (Sugerencia: si un

vector de impulso angular no es de magnitud cero, pero tiene componente z igual a cero en un estado cuántico, entonces habrá otros estados cuánticos para los que tendrá una componente z diferente de cero). (d) Ahora, considerar las interacciones entre los electrones que realmente están presentes. ¿Pueden ellas cambiar la conclusión respecto al impulso angular total de la subcapa? ¿Qué sucede con el impulso angular de spin total y el impulso angular orbital total?

10. (a) Hacer un dibujo aproximado de los niveles de energía del ^6C en las configuraciones $2p^2$ y $2p3s$, utilizando información de la figura 10-8. Indicar los desdoblamientos de estructura fina de estos niveles, exagerando su magnitud. (b) Mostrar todas las transiciones permitidas por las reglas de selección del acoplamiento LS.

11. (a) Encontrar un estado con números cuánticos s', l', j' para el cual el valor del factor g de Landé se encuentra fuera del intervalo $g = 1$ a $g = 2$. (b) Hacer un dibujo similar a la figura 10-10, que muestra los vectores del impulso angular y momento dipolar magnético para este estado.

12. Considerar la configuración $2p3s$ del átomo de ^6C en la que el ordenamiento de los niveles, de acuerdo con s', l', j', y las intensidades relativas de la dependencia de la energía con estos números cuánticos, son lo que es normal en acoplamiento LS. Dibujar un diagrama esquemático de los niveles de energía para esta configuración, como en la figura 10-6. Utilizar la misma escala (exagerada) para los desdoblamientos de estructura fina, dados por la regla del intervalo de Landé, para todos los niveles dentro de un multiplete dado. (b) Marcar cada nivel con la notación espectroscópica.

13. Sobre el diagrama de niveles de energía del problema 12, dibuje a la misma escala (muy exagerada) los desdoblamientos por efecto Zeeman, dados por el factor g de Landé, para cada nivel bajo la influencia de un campo magnético externo débil.

14. (a) Contar el número total de componentes del problema 13, es decir, el número total de estados cuánticos, diferentes en la configuración. (b) Demostrar que ésto es igual a la degeneración de la configuración en la aproximación de Hartree, es decir, el producto de los factores de degeneración $2(2l + 1)$ para cada uno de los dos electrones ópticamente activos en la configuración.

15. Derivar una expresión para el desdoblamiento de los niveles de singulete por efecto Zeeman. (Sugerencia: empezar por el principio y tomar $s' = 0$ de manera que se obtenga una expresión sencilla para el momento dipolar magnético total).

16. (a) Construir un diagrama similar a la figura 10-11, que muestre las transiciones permitidas por las reglas de selección entre los estados de singulete $2p3s\ ^1P_1$ y $2p^2\ ^1D_2$ del átomo de ^6C. (b) Verificar que en estas transiciones se producirá el patrón Zeeman normal de tres líneas espectrales. (c) Calcular la diferencia en longitud de onda de estas tres líneas, cuando el átomo se encuentra en un campo externo de 0.1 tesla. (Sugerencia: utilice una fórmula para la diferencia en longitud de onda que se derivó en el ejemplo 10-1). (d) Calcular la longitud de onda de la única línea que se obtiene cuando no hay campo externo, utilizando la información de la figura 10-8.

17. (a) Volver a dibujar los niveles de energía de la figura 10-11, para un caso en el que la intensidad del campo magnético externo aumente a un punto tal que los desdoblamientos sean descritos por el efecto Paschen-Bach. (Sugerencia: aquí, j' ya no es un número cuántico útil). (b) Volver a dibujar las transiciones permitidas por las reglas de selección de m_s' y m_l', como en la figura 10-11, y demostrar que entonces producen líneas espectrales que se desdoblan en solo tres componentes.

18. (a) Utilizar la información contenida en la figura 10-8 para estimar la magnitud de la energía asociada con el acoplamiento de los dos impulsos angulares de spin para formar el impulso angular de spin total, y con el acoplamiento de los dos impulsos angulares orbitales para formar el impulso angular orbital total, en la configuración $2p^2$ del átomo de ^6C. (b) Después, estimar la intensidad de un campo externo que producirá una energía de orientación con el momento dipolar magnético de cada electrón ópticamente activo, mayor que la energía estimada en (a). En un campo como este, los acoplamientos de los impulsos angulares de los electrones ópticamente activos, se destruyen completamente. (c) ¿Se tiene disponible un campo como ese en el laboratorio?

11

Estadística cuántica

11.1 Introducción 439

Utilidad de las consideraciones estadísticas; distribución de Boltzmann.

11.2 Indistinguibilidad y estadística cuántica 440

Inaplicabilidad de la distribución de Boltzmann a sistemas cuánticos; repaso de la indistinguibilidad; proposición del factor de inhibición para fermiones; derivación del factor de aumento de bosones.

11.3 Funciones de distribución cuánticas 444

Equilibrio térmico; balance detallado; derivación de la distribución de Bose combinando el balance detallado, la distribución de Boltzmann y el factor de aumento de bosones; derivación de la distribución de Fermi por la misma técnica utilizando el factor de inhibición de Fermi.

11.4 Comparación de las funciones de distribución 447

Constantes de normalización; energía de Fermi; interpretación cualitativa del comportamiento de la distribución de Fermi a bajas temperaturas; convergencia de las distribuciones clásica y cuántica a altas energías; distribución clásica intermedia a las distribuciones cuánticas a bajas energías; comparación tabulada de las distribuciones.

11.5 Calor específico de un sólido cristalino 452

Ley de Dulong y Petit; tratamiento de Einstein; tratamiento de Debye; modos de vibración elásticos; aplicabilidad de la distribución de Boltzmann; temperatura de Debye; fórmula de Debye.

11.6 La distribución de Boltzmann como una aproximación a las distribuciones cuánticas **456**

Factor de Boltzmann; aplicabilidad a las moléculas de un gas; resonancia magnética nuclear.

11.7 El laser **457**

Relación entre emisión espontánea, absorción estimulada y emisión estimulada; derivación de los coeficientes A y B de Einstein; predicción de la relación emisión a absorción. Inversión de población por bombeo óptico; coherencia; niveles de energía de un laser de rubí; diseño de un laser; el laser como ejemplo del factor de aumento de bosones.

11.8 El gas de fotones **463**

Distribución de Bose para fotones; derivación del espectro de Planck.

11.9 El gas de fonones **464**

Análisis cualitativo de los fonones.

11.10 Condensación de Bose y helio líquido **465**

Factor de normalización de la distribución de Bose y su evaluación por conteo de estados de partícula en una caja; energía promedio por partícula para un gas ideal de bosones; efecto de degeneración; relación del término de degeneración con la razón de la distancia entre partículas a la longitud de onda de de Broglie; condensación de Bose; estimación del término de degeneración para helio; propiedades del helio líquido; explicación por medio del factor de aumento de bosones.

11.11 El gas de electrones libres **471**

Energía promedio por partícula para un gas ideal de fermiones; gas de electrones; distribución de energías de electrones de conducción; calor específico de electrones de conducción.

11.12 Potencial de contacto y emisión termiónica **474**

Propiedades observadas y explicación mediante la distribución de Fermi; funciones de trabajo y energías de Fermi.

11.13 Descripciones clásica y cuántica del estado de un sistema **476**

Espacio fase; limitaciones cuánticas en la celda del espacio fase de volumen mínimo; relación con la entropía.

Preguntas **478**

Problemas **479**

11

Estadística cuántica

11.1 Introducción

A medida que aumenta el número de constituyentes de un sistema físico, se vuelve más complicada la descripción detallada del comportamiento del mismo. Por lo tanto, en el proceso de este análisis de átomos con un solo electrón a átomos multielectrónicos, después moléculas y finalmente sólidos, puede anticiparse que el tratamiento detallado de estos sistemas irá aumentando en complejidad y dificultad. Como un ejemplo familiar, considérese lo que implicaría tratar de describir el movimiento de una molécula de un gas, en un sistema que contenga un litro de ese gas en condiciones estándar (conteniendo $\simeq 10^{22}$ moléculas). Afortunadamente, por lo general no es necesario tener información tan detallada para determinar las propiedades más importantes del sistema, es decir, determinar las propiedades mensurables, como la presión y la temperatura del gas. Además, la complejidad intrínseca de un sistema que contiene un gran número de constituyentes, a menudo es la causante de muchas de las propiedades simples que se observan, como se explicará enseguida.

Si se explican los principios generales de la mecánica (tales como las leyes de conservación) a un sistema de muchas partículas, se pueden ignorar los detalles del movimiento o interacción de cada partícula y deducir propiedades simples del comportamiento del sistema, a partir de consideraciones *estadísticas* solamente. De hecho, aún un enfoque estadístico elemental permite describir y explicar una amplia variedad de fenómenos físicos y proporciona una buena perspectiva del comportamiento de sistemas físicos reales. La razón es que existe una relación entre las propiedades observadas y el comportamiento más probable de un sistema, con tal que contenga suficientes partículas como para que las consideraciones estadísticas sean válidas. Como ejemplo considérese un sistema aislado que contiene un gran número de partículas clásicas en equilibrio térmico entre sí, a una temperatura T. Para alcanzar y mantener este equilibrio, las partículas deben poder intercambiar energía entre ellas. En esos intercambios, la energía de una partícula dada fluctuará, de tal modo que en ocasiones tendrá una energía mayor y en otras una energía menor al valor promedio de la energía de una partícula del sistema. Sin embargo, la teoría clásica de la mecánica estadística requiere que la energía que sucesivamente va adquiriendo una partícula, o que las energías de las partículas, estén distribuídas de acuerdo con una función de distribución de probabilidad bien definida, llamada *distribución de Boltzmann*, distribución que tiene una forma dependiente de la temperatura T. Sabiendo las probabilidades de que las partículas del sistema ocupen los diversos estados de energía, se pueden determinar una gran variedad de propiedades importantes del sistema completo, utilizando estas propiedades de ocupación para calcular promedios sobre el sistema de las propiedades correspondientes de las partículas cuando éstas se encuentran en estos estados.

Un ejemplo más específico, que seguramente el estudiante ya se ha encontrado en sus estudios anteriores, es la relación entre las propiedades de un gas clásico, la distribución de Maxwell de las velocidades de las moléculas del gas. La distribución de Maxwell es un caso particular de la distribución de Boltzmann, descrita por una función de distribución $N(v)$, donde $N(v)\,dv$ proporciona la probabilidad de que una molécula tenga una velocidad en el intervalo entre v y $v + dv$. De ella, se pueden calcular cantidades tales como la velocidad promedio (que se relaciona con el impulso de las moléculas), la velocidad al cuadrado promedio (relacionada con su energía), etc., y de estas cantidades *promedio,* se calculan las propiedades observables, tales como, la presión (relacionada con el impulso) y temperatura (relacionada a la energía), etc.

Los tratamientos estadísticos también son aplicables, como una aproximación, en sistemas que contienen un número moderadamente grande de partículas. Por ejemplo, en el capítulo 15 se aplicará un tratamiento estadístico a un núcleo (conteniendo $\simeq 10^2$ nucleones) en el llamado modelo del gas de Fermi de núcleos. Sin embargo, en ese tratamiento no se utilizará la distribución de Boltzmann, ya que no es válida para las partículas cuánticas como las que se encuentran en el núcleo.

En este capítulo se buscarán funciones de distribución que sean válidas para partículas cuánticas. Se encontrará que existen dos: la *distribución de Bose,* que se aplica a partículas que pueden ser descritas por eigenfunciones que son simétricas respecto a un intercambio de cualquiera dos marcas de las partículas (como partículas α o fotones); y la *distribución de Fermi,* aplicable a partículas que deben ser descritas por eigenfunciones que son antisimétricas ante este intercambio de marcas (como electrones, protones y neutrones).

Primero se hará un repaso de los procedimientos de la mecánica estadística clásica, desarrollados en el apéndice C y utilizados en el capítulo 1, que conducen a la distribución de Boltzmann. Después, se verá cómo las consideraciones cuánticas fuerzan cambios significativos en los procedimientos clásicos. Enseguida, se derivarán las funciones de distribución cuánticas, con argumentos sencillos de equilibrio que empiezan con la distribución de Boltzmann. Después se obtendrán ideas muy útiles, comparando entre sí las funciones de distribución. Por último se darán una gran variedad de ejemplos de las aplicaciones de cada una de ellas y se compararán sus predicciones con la experimentación. En este proceso, se examinarán muchos fenómenos importantes, tales como superfluidez, calor específico de la red y electrónico de sólidos, y amplificación de luz por la emisión estimulada de radiación (el laser).

11.2 Indistinguibilidad y estadística cuántica

La distribución de Boltzmann es un resultado fundamental de la física clásica, no de la física cuántica. Sin embargo, como ya se vió antes y como se verá de nuevo, frecuentemente se utiliza al estudiar física cuántica. Por estas razones, en este libro se han incluido dos argumentos bastante diferentes, cada uno de los cuales conduce a la distribución de Boltzmann, pero estos argumentos aparecen en el apéndice C. Se recomienda que el estudiante lea o vuelva a leer dicho apéndice en este momento.

El primer argumento en el apéndice C implica contar el número de maneras indistinguibles en que las entidades de un sistema en equilibrio térmico pueden dividirse entre sí la energía total constante del sistema. La distribución de Boltzmann se obtiene suponiendo que todas las divisiones posibles ocurren con la misma probabilidad. En este procedimiento, una división de energía se cuenta como distinguible de alguna otra división si sólo difiere de esa división por un rearreglo de entidades idénticas entre diferentes estados de energía. Es decir, las entidades idénticas son consideradas como si fueran distinguibles en esos rearreglos. En el segundo argumento que conduce a la distribución de Boltzmann se supone que la presencia de una entidad en un estado de energía particular, de ninguna manera inhibe o aumenta la probabilidad

de que otra entidad idéntica se encuentre en ese estado y, una vez más, que todas las divisiones posibles de la energía del sistema ocurren con la misma probabilidad.

Estas suposiciones son perfectamente aceptables en la física clásica. En la física cuántica, la suposición de que todas las divisiones posibles ocurren con la misma probabilidad sigue siendo aceptable; pero no así las otras suposiciones, tal y como se vió en la sección 9-2, si existe un traslape apreciable de las funciones de onda de dos partículas idénticas en un sistema, aparecen efectos no clásicos importantes como consecuencia de la *indistinguibilidad* de partículas idénticas, (es decir, entidades idénticas). Una de ellas es que los resultados mensurables no pueden depender de la asignación de marcas a las partículas idénticas. De tal modo, la definición clásica de divisiones distinguibles de la energía de un sistema es errónea, ya que si no hay un modo no ambiguo de marcar las partículas idénticas del sistema, entonces, no hay forma de distinguir entre dos divisiones que puedan diferir entre si solamente al volver a arreglarse, aún en rearreglos entre diferentes estados cuánticos (es decir, estados de energía). Otro efecto de la indistinguibilidad de las partículas cuánticas, es que la presencia de una en un estado cuántico particular, definitivamente afecta la posibilidad de que otra partícula cuántica se encuentre en ese estado. Ya se ha visto que si dos partículas idénticas son descritas por una eigenfunción total antisimétrica, es decir, si son partículas que como los electrones están sujetos al principio de exclusión, entonces, la presencia de una de ellas en algún estado cuántico, inhibe completamente la posibilidad de que la otra se encuentre en ese estado. Pronto se verá que si las dos partículas idénticas son descritas por una eigenfunción total simétrica, es decir, si se comportan como partículas α en el sentido de que no están sujetos al principio de exclusión, entonces, la presencia de una de ellas en un estado cuántico aumenta considerablemente la posibilidad de que la otra se encuentre en ese mismo estado.

Desde luego que si el sistema contiene partículas cuánticas idénticas, pero las circunstancias son tales que el traslape de las funciones de onda de cualquiera dos partículas es despreciable, entonces las partículas realmente si son distinguibles experimentalmente. Bajo estas circunstancias, los efectos de la indistinguibilidad se vuelven despreciables, como ya se mencionó en las secciones 9-2 y 9-4, y las suposiciones que fundamentan la distribución de Boltzmann se vuelven válidas. Una vez más, un ejemplo de un sistema como ese, es un gas. En el intervalo de densidades que normalmente se encuentra en el laboratorio, las funciones de onda de las moléculas, que desde luego son partículas cuánticas idénticas, no se traslapan apreciablemente y, por lo tanto, la distribución de Boltzmann se puede aplicar correctamente para predecir las propiedades del sistema.

En la estadística cuántica, las partículas cuánticas que son descritas por eigenfunciones antisimétricas, se les llama *fermiones*, y las partículas que son descritas por eigenfunciones simétricas se les llama *bosones*. Es decir, la eigenfunción para un sistema de varios fermiones idénticos cambia de signo si se intercambian las marcas de cualesquiera dos de ellos, mientras que la eigenfunción para un sistema de bosones idénticos no cambia de signo ante este intercambio de marcas. En la tabla 9-1, se encuentra una lista parcial de fermiones y bosones. Estos nombres son en honor de dos físicos, Fermi y Bose, que contribuyeron en mucho al desarrollo de la estadística cuántica.

El hecho de que un fermión evita que otro fermión idéntico se le una en el mismo estado cuántico, es decir, el principio de exclusión, y algunas de sus extremadamente importantes consecuencias, es algo con lo que ya se adquirió familiaridad, a través del estudio de los átomos multielectrónicos. Lo anterior se puede describir un tanto más formalmente, diciendo que: *si ya se tienen n fermiones en un estado cuántico, la probabilidad de que se les una uno más, será menor por un factor de inhibición (1-n), que la que se tendrá si no hubieran los requisitos de indistinguibilidad mecánico-cuánticos.* Si $n = 0$, el factor tiene el valor $(1-0)=1$ y por lo tanto no hay inhibición de la probabilidad para que el primer fermión ocupe el estado. Pero para el estado $n = 1$, el factor tiene el valor $(1-1)=0$, y por lo tanto, un segundo fermión es completamente inhibido en su posibilidad de ocupar ese estado. Nótese que el factor limita automáticamente el número n de fermiones en cualquier estado cuántico particular a los valores $n = 0$ y $n = 1$, en

concordancia con el principio de exclusión. Por lo tanto, el uso del plural en la precedente afirmación subrayada, podría parecer poco apropiado; se utiliza para que dicha afirmación sea análoga a la correspondiente a bosones que seguirá a continuación, y porque, de otra forma, el argumento que sigue a la afirmación sería redundante.

No se ha tenido oportunidad de demostrar que la presencia de un bosón en un estado cuántico, aumenta la probabilidad de encontrar un segundo bosón idéntico en ese estado, ya que se ha trabajado muy poco con bosones desde que se desarrolló la mecánica cuántica de partículas indistinguibles. Lo anterior será demostrado a continuación.

Considérese la eigenfunción simétrica para un sistema de dos bosones idénticos, (9-8).

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)]$$

Recuérdese que $\psi_\alpha(1)$ quiere decir que la partícula marcada con 1 se encuentra en el estado cuántico α, $\psi_\beta(2)$ quiere decir que la partícula 2 se encuentra que el estado β, etc., y que a pesar de que se usan marcas para las partículas, las cantidades observables como la densidad de probabilidad $\psi_S^*\psi_S$ tienen valores que son independientes de la asignación de marcas a las partículas. Recuérdese también que ψ_S está normalizada, por el factor de normalización $1/\sqrt{2}$, si se supone que $\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$ y $\psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)$ están normalizadas. A continuación, ambos bosones se colocan en el mismo estado, por ejemplo en el estado β, igualando $\alpha = \beta$. Entonces, la eigenfunción será

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\beta(1)\psi_\beta(2) + \psi_\beta(1)\psi_\beta(2)]$$

$$= \frac{2}{\sqrt{2}} \psi_\beta(1)\psi_\beta(2) = \sqrt{2}\, \psi_\beta(1)\psi_\beta(2)$$

y la densidad de probabilidad será:

$$\psi_S^*\psi_S = 2\, \psi_\beta^*(1)\psi_\beta^*(2)\psi_\beta(1)\psi_\beta(2) \qquad (11\text{-}1)$$

¿Cuál sería la eigenfunción y la densidad de probabilidad para este sistema de dos partículas idénticas si no se hubieran tomado en consideración los requisitos mecánico-cuánticos de indistinguibilidad de partículas idénticas? La eigenfunción tomaría la forma dada por (9-4) o (9-5), ya que fueron obtenidas directamente de la ecuación de Schrödinger antes de aplicar las condiciones de indistinguibilidad. Tómese, por ejemplo, (9-4)

$$\psi = \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$$

Esta eigenfunción ψ está normalizada, ya que se ha supuesto que $\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)$ está normalizada. Para el presente caso, donde $\alpha = \beta$, se tiene;

$$\psi = \psi_\beta(1)\psi_\beta(2)$$

y la densidad de probabilidad normalizada será,

$$\psi^*\psi = \psi_\beta^*(1)\psi_\beta^*(2)\psi_\beta(1)\psi_\beta(2) \qquad (11\text{-}2)$$

Resulta conveniente comparar las densidades de probabilidad (11-1) y (11-2) ya que ambas han sido apropiadamente normalizadas. Al hacerlo, se puede ver que la probabilidad $\psi_S^*\psi_S$ de tener dos bosones en el mismo estado cuántico, es el doble de la probabilidad cuando el sistema está descrito por una eigenfunción que no satisface los requisitos mecánico-cuántico de indistinguibilidad. Lo anterior se puede expresar diciendo que la probabilidad de tener dos

bosones en el mismo estado es el doble de lo que sería para partículas clásicas. Por lo tanto, la presencia de un bosón en un estado cuántico particular, duplica la posibilidad de que el segundo bosón se encuentre en ese estado, comparado con el caso de partículas clásicas, donde no existe una correlación particular entre los estados cuánticos ocupados por las partículas.

Ejemplo 11-1. Comparar la probabilidad de que tres bosones se encuentran en un estado cuántico particular, con la probabilidad de que tres partículas clásicas se encuentren en el mismo estado.

Examinando la eigenfunción simétrica, obtenida en el ejemplo 9-3, para un sistema con tres bosones, se encuentra que contiene $3! = 3 \times 2 \times 1 = 6$ términos de la forma $\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3)$, y que la constante de normalización es $1/\sqrt{3!}$. Igualando $\alpha = \beta = \gamma$ para que los bosones estén en el mismo estado, la densidad de probabilidad tendrá $(3!)^2$ términos iguales, pero multiplicada por el cuadrado de la constante de normalización, $(1/\sqrt{3!})^2$. De esta manera, la probabilidad es mayor por un factor de $(3!)^2/3!$ de la que sería si se tuviera tres partículas clásicas idénticas en el mismo estado. En consecuencia, para el caso de bosones, la probabilidad es mayor por un factor de 3!. ◀

Los resultados del ejemplo 11-1 obviamente se pueden generalizar al caso de n bosones idénticos en el mismo estado cuántico, y puede demostrarse que la probabilidad de que esto ocurra es mayor por un factor de $n! = n(n-1)(n-2)\cdots 1$, comparada con la probabilidad de que lo anterior ocurra para el caso de n partículas clásicas idénticas. Estos resultados se pueden observar desde un punto de vista más útil, contestando la siguiente pregunta; si ya existen n bosones en un estado cuántico final particular de un sistema, en el cual los bosones realizan transiciones desde varios estados iniciales a varios estados finales, ¿cuál es la probabilidad de que un bosón adicional llevara a cabo una transición a ese estado final particular?

Sea P_1 la probabilidad de que se agregue un primer bosón al estado, originalmente vacío, particularmente interesante. Si el efecto de ampliación que se estudia no existiera, la probabilidad de que existan n bosones en ese estado sería simplemente la n —ésima potencia de P_1 ya que las probabilidades de ir añadiendo bosones sucesivamente serán todas iguales y la adición se llevaría a cabo independientemenete y las probabilidades independientes son multiplicativas. Es decir,

$$P_n = (P_1)^n$$

Sin embargo, la probabilidad real de que existan n bosones en ese estado se aumenta al valor:

$$P_n^{\text{bosón}} = n!\, P_n = n!\,(P_1)^n$$

La probabilidad real de que existan $n+1$ bosones en ese estado es

$$P_{n+1}^{\text{bosón}} = (n+1)!\, P_{n+1}$$

Ya que $(n+1)! = (n+1)n!$, y como $P_{n+1} = (P_1)^{n+1} = (P_1)^n P_1 = P_n P_1$, se tiene:

$$P_{n+1}^{\text{bosón}} = (n+1)n!\, P_n P_1$$

o bien

$$P_{n+1}^{\text{bosón}} = (1+n) P_1 P_n^{\text{bosón}} \tag{11-3}$$

$P_n^{\text{bosón}}$ es la probabilidad de que realmente se encuentren n bosones en ese estado, de modo que la respuesta a la pregunta propuesta, "¿si ya existen n bosones en un estado cuántico final particular....?", es $(1+n)P_1$. Sin embargo, P_1 es la probabilidad de agregar cualquiera de los bosones, si no hubiera aumento. Por lo tanto, se concluye que *si ya existen n bosones en un estado cuántico, la probabilidad de que se les una uno más, es mayor por un factor de aumento* $(1+n)$ *de la que sería si no hubiera requisitos mecánico-cuánticos de indistinguibilidad.*

11.3 Las funciones de distribución cuánticas

El procedimiento más frecuentemente usado para obtener funciones de distribución que se ajusten a los requisitos de indistinguibilidad de las partículas cuánticas, implica la modificación del primer argumento en el apéndice C de modo que se satisfagan estos requisitos y después extender los cálculos para el caso de un número grande de partículas y estados de energía. Aquí se utilizará un procedimiento más simple y que corresponde a los fundamentos del segundo.

Como caso preliminar, considérese un sistema de *partículas clásicas* idénticas en equilibrio térmico. Las partículas intercambian energía, pero actúan independientemente en cuanto que una no afecta el comportamiento específico de otra. Enfocando la atención en dos estados de energía particular de estas partículas $\mathscr{E}_1$ y $\mathscr{E}_2$, y sean n_1 y n_2 los números promedio de partículas que los ocupan. Asimismo, sea $R_{1\to 2}$, la razón promedio a la cual una partícula del sistema, que se encuentra en el estado 1, realiza una transición al estado 2, y $R_{2\to 1}$ la razón a la cual una partícula que se encuentra en el estado 2 realiza una transición al estado 1. Tanto $R_{1\to 2}$ como $R_{2\to 1}$ son razones por partícula, es decir, probabilidades por segundo por partícula. Por lo tanto, la razón total a la cual las partículas del sistema realizan transiciones $1 \to 2$ será $n_1 R_{1\to 2}$, ya que n_1 es el número de partículas que tienen oportunidad de hacerlo, mientras que $R_{1\to 2}$ es la probabilidad por segundo de que cada una tome esa probabilidad. La razón total a la cual las partículas del sistema realizarán transiciones $2 \to 1$ será $n_2 R_{2\to 1}$.

Si estas razones de transición totales son iguales, es decir, si:

$$n_1 R_{1\to 2} = n_2 R_{2\to 1} \tag{11-4}$$

y si lo mismo se aplica a razones de transición totales "prospectivas" y "retrospectivas" entre todos los pares de estados de energía de partículas, entonces, evidentemente la población promedio de estos estados permanecerá constante en el tiempo. Sin embargo, la condición que caracteriza el equilibrio térmico son las poblaciones de estado constantes en "promedio". La ecuación (11-4) es la condición que garantiza que el equilibrio supuesto en todos los argumentos anteriores se mantiene. En principio el equilibrio también se mantiene balanceando conjuntos interconectados de ciclos de transición, cada uno de los cuales involucra varios estados de energía, sin balancear pares individuales de razones totales de transición como en (11-4); sin embargo, no existe ninguna evidencia de que en la práctica, se dé esta situación. Describiendo lo anterior de otra forma, (11-4) puede tomarse como un postulado, llamado *balance detallado*, cuya justificación reside en el hecho de que conduce a resultados que coinciden con el experimento.

Nótese que (11-4) implica

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{R_{2\to 1}}{R_{1\to 2}} \tag{11-5}$$

Ahora bien, en equilibrio térmico, el promedio ó número más probable de partículas n que se encontrarán en el estado 1 en un sistema clásico, estará dado por la distribución de Boltzmann, que se deriva en el apéndice C, calculada en el estado de energía $\mathscr{E}_1$. Por lo tanto,

$$n_1 = n(\mathscr{E}_1) = Ae^{-\mathscr{E}_1/kT} \tag{11-6}$$

y similarmente para n_2. Por lo tanto la razón de poblaciones tendría el valor

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{e^{-\mathscr{E}_1/kT}}{e^{-\mathscr{E}_2/kT}} \tag{11-7}$$

En consecuencia, (11-5) y (11-7) demuestran que las razones de transición por partícula deberán estar en la razón

$$\frac{R_{2\to1}}{R_{1\to2}} = \frac{e^{-\mathscr{E}_1/kT}}{e^{-\mathscr{E}_2/kT}} \tag{11-8}$$

para partículas clásicas.

Enseguida, se aplicará la condición de equilibrio térmico (11-4), a un sistema de bosones. Se escribe como:

$$n_1 R_{1\to2}^{\text{bosón}} = n_2 R_{2\to1}^{\text{bosón}} \tag{11-9}$$

donde n_1 y n_2 son las poblaciones promedio de bosones en dos estados cuánticos interesantes, y $R_{1\to2}^{\text{bosón}}$, $R_{2\to1}^{\text{bosón}}$ son las razones de transición por bosón, entre estos estados. Estas razones se pueden explicar en términos de las razones obtenidas en el caso de partículas clásicas, simplemente multiplicando las razones clásicas por el factor de aumento $(1 + n)$ que se derivó al final de la sección 11-2. Es decir, como existen en promedio n_2 bosones en el estado cuántico 2, cuando se lleva a cabo una transición $1 \to 2$ la probabilidad por segundo por partícula real, $R_{1\to2}^{\text{bosón}}$, es mayor por un factor $(1 + n_2)$ que el valor $R_{1\to2}$, que es la razón que tendría una partícula clásica que no satisface los requisitos de indistinguibilidad. A medida que n toma valores desde $\simeq 0$ (para un estado que casi nunca es ocupado por un bosón) hasta valores grandes (para estados que contienen cada vez más bosones), el factor de aumento varía desde $\simeq 1$ (casi no hay aumento) hasta valores cada vez mayores (crecimientos cada vez mayores). Para resumir, se tiene

$$R_{1\to2}^{\text{bosón}} = (1 + n_2)R_{1\to2} \tag{11-10}$$

y similarmente,

$$R_{2\to1}^{\text{bosón}} = (1 + n_1)R_{2\to1} \tag{11-11}$$

Combinando (11-9), (11-10) y (11-11), se obtiene

$$n_1(1 + n_2)R_{1\to2} = n_2(1 + n_1)R_{2\to1}$$

o bien,

$$\frac{n_1(1 + n_2)}{n_2(1 + n_1)} = \frac{R_{2\to1}}{R_{1\to2}} = \frac{e^{-\mathscr{E}_1/kT}}{e^{-\mathscr{E}_2/kT}} \tag{11-12}$$

donde se ha utilizado (11-8) para calcular las relaciones de las razones de transición clásicas por partículas en términos de la distribución de Boltzmann. La ecuación (11-12) se puede escribir como

$$\frac{n_1}{1 + n_1} e^{\mathscr{E}_1/kT} = \frac{n_2}{1 + n_2} e^{\mathscr{E}_2/kT} \tag{11-13}$$

El primer miembro de esta igualdad no implica propiedades del estado 2, y el segundo miembro no implica propiedades del estado 1. De esta manera, las propiedades comunes de ambos lados no pueden involucrar propiedades comunes a ambos. Así es, obviamente, ya que la temperatura de equilibrio común T se encuentra en ambos miembros. Por lo tanto, se concluye que ambos miembros de (11-13) son iguales a una función de T, que en forma más conveniente se escribe como $e^{-\alpha}$, donde $\alpha = \alpha(T)$. Igualando el primer miembro al valor común, se tiene

$$\frac{n_1}{1 + n_1} e^{\mathscr{E}_1/kT} = e^{-\alpha}$$

o bien,

$$\frac{n_1}{1 + n_1} = e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)}$$

de modo que

$$n_1 = n_1 e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)} + e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)}$$

o también

$$n_1[1 - e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)}] = e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)}$$

por lo tanto,

$$n_1 = \frac{e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)}}{1 - e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)}} = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\mathscr{E}_1/kT} - 1}$$

Si se utiliza el segundo miembro de (11-13), se obtiene un resultado completamente similar para la dependencia de n_2 en $\mathscr{E}_2$. De hecho, este resultado se obtiene para el número de bosones promedio o probable que ocupe un estado cuántico de energía $\mathscr{E}$. Así, se obtiene

$$n(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\mathscr{E}/kT} - 1} \tag{11-14}$$

Esta es la *distribución de Bose* que especifica el número probable de bosones, de un sistema en equilibrio a temperatura T, que se encontrarán en un estado de energía $\mathscr{E}$.

El mismo tipo de argumentos se puede aplicar a un sistema de *fermiones* en equilibrio; para estas partículas, la condición de equilibrio térmico, (11-4), se escribe como:

$$n_1 R_{1\to 2}^{\text{fermión}} = n_2 R_{2\to 1}^{\text{fermión}} \tag{11-15}$$

Aquí, $R_{1\to 2}^{\text{fermión}}$ es la razón por fermión para transiciones entre los estados cuánticos 1 y 2, $R_{2\to 1}^{\text{fermión}}$ lo mismo para transiciones $2 \to 1$ y n_1 y n_2 son la probabilidad promedio de estos estados. Debido al principio de exclusión, las poblaciones instantáneas de cualquiera de los estados puede ser únicamente cero a uno. Las poblaciones fluctúan en el tiempo debido a la naturaleza estadística de los procesos que mantienen el equilibrio térmico y tienen los valores promedio dados por n_1 y n_2. Las razones de transición para fermiones se pueden expresar en términos de las razones para partículas clásicas, simplemente multiplicando las razones clásicas por el factor de inhibición $(1 - n)$ que se estudió a la mitad de la sección 11-2. Como n se interpreta como la población promedio de un estado cuántico, $(1 - n)$ es el valor promedio del factor de inhibición, y justamente esto es lo que aquí se necesita. A medida que n toma valores desde $\simeq 0$ (para un estado que casi nunca contiene un fermión) hasta $\simeq 1$ (para un estado que casi siempre contiene un fermión), el factor de inhibición varía desde $\simeq 1$ (factor de inhibición casi nulo) hasta $\simeq 0$ (inhibición casi total), en concordancia con el principio de exclusión. Por lo tanto, se tiene:

$$R_{1\to 2}^{\text{fermión}} = (1 - n_2) R_{1\to 2} \tag{11-16}$$

y

$$R_{2\to 1}^{\text{fermión}} = (1 - n_1) R_{2\to 1} \tag{11-17}$$

donde $R_{1\to 2}$ y $R_{2\to 1}$ son las razones para una partícula clásica que no satisface los requisitos de indistinguibilidad que conducen al principio de exclusión para fermiones.

Combinando (11-15), (11-16) y (11-17), se obtiene

$$n_1(1 - n_2)R_{1\to 2} = n_2(1 - n_1)R_{2\to 1}$$

o bien

$$\frac{n_1(1 - n_2)}{n_2(1 - n_1)} = \frac{R_{2\to 1}}{R_{1\to 2}} = \frac{e^{-\mathscr{E}_1/kT}}{e^{-\mathscr{E}_2/kT}} \tag{11-18}$$

donde se ha utilizado (11-8) para calcular la relación de las razones de transición clásicas por partícula en términos de las probabilidades de Boltzmann. La ecuación (11-18) se puede expresar como:

$$\frac{n_1}{1 - n_1} e^{\mathscr{E}_1/kT} = \frac{n_2}{1 - n_2} e^{\mathscr{E}_2/kT} \tag{11-19}$$

Por el mismo razonamiento utilizado anteriormente, se puede ver que ambos miembros de esta ecuación son iguales a alguna función de T, que una vez más se escribe como $e^{-\alpha}$, donde $\alpha = \alpha(T)$. Igualando el primer miembro al valor común, se tiene

$$\frac{n_1}{1 - n_1} e^{\mathscr{E}_1/kT} = e^{-\alpha}$$

o bien

$$\frac{n_1}{1 - n_1} = e^{-(\alpha + \mathscr{E}_1/kT)}$$

de modo que

$$n_1 = -n_1 e^{-(\alpha+\mathscr{E}_1/kT)} + e^{-(\alpha+\mathscr{E}_1/kT)}$$

o también

$$n_1[1 + e^{-(\alpha+\mathscr{E}_1/kT)}] = e^{-(\alpha+\mathscr{E}_1/kT)}$$

Por lo tanto,

$$n_1 = \frac{e^{-(\alpha+\mathscr{E}_1/kT)}}{1 + e^{-(\alpha+\mathscr{E}_1/kT)}} = \frac{1}{e^{\alpha}e^{\mathscr{E}_1/kT} + 1}$$

Esto se escribe como

$$n(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\alpha}e^{\mathscr{E}/kT} + 1} \tag{11-20}$$

donde, una vez más, se elimina el subíndice 1, ya que para todos los estados cuánticos, se obtienen los mismos resultados. Esto es la *distribución de Fermi* que proporciona el número promedio o probable de fermiones, de un sistema en equilibrio a temperatura T, que deberá encontrarse en estado cuántico de energía $\mathscr{E}$.

11.4 Comparación de las funciones de distribución

Considérese primero, la distribución de Boltzmann (11-6)

$$n(\mathscr{E}) = Ae^{-\mathscr{E}/kT}$$

Si la constante multiplicativa A se iguala a $e^{-\alpha}$, la *distribución de Boltzmann será*

$$n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\alpha}e^{\mathscr{E}/kT}} \tag{11-21}$$

Se sabe, de (11-14), que la *distribución de Bose* es:

$$n_{\text{Bose}}(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\alpha}e^{\mathscr{E}/kT} - 1} \tag{11-22}$$

y (11-20) dice que la *distribución de Fermi* es

$$n_{\text{Fermi}}(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\alpha}e^{\mathscr{E}/kT} + 1} \tag{11.23}$$

En estas relaciones, k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura de equilibrio del sistema. El parámetro α, para un sistema y temperatura dados, se especifica por el número total de partículas que contiene. Por ejemplo, al final del apéndice C se calcula $A = e^{-\alpha}$ para una forma especial de la distribución de Boltzmann que se aplica a un sistema de osciladores armónicos simples; donde se define $n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E})$ como una medida de la probabilidad de encontrar a uno de ellos en *particular* en un estado de energía $\mathscr{E}$. El resultado fue $A = 1/kT$. Si en ese caso se define $n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E})$ en términos de la probabilidad de encontrar *cualquiera* de los osciladores en el estado, o el número probable en el estado, obviamente se hubiera encontrado $A = \mathscr{N}/kT$, donde $\mathscr{N}$ es el número total de osciladores en el sistema. Esencialmente, ésta es la forma como se define $n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E})$ ya que proporciona el número más probable de partículas clásicas en el estado de energía $\mathscr{E}$. En otras palabras, A es la constante de normalización cuyo valor para una T dada queda especificado por el número total de partículas en el sistema descrito por la distribución de Boltzmann. De este modo, esto mismo se aplica al parámetro α que aparece en esa distribución.

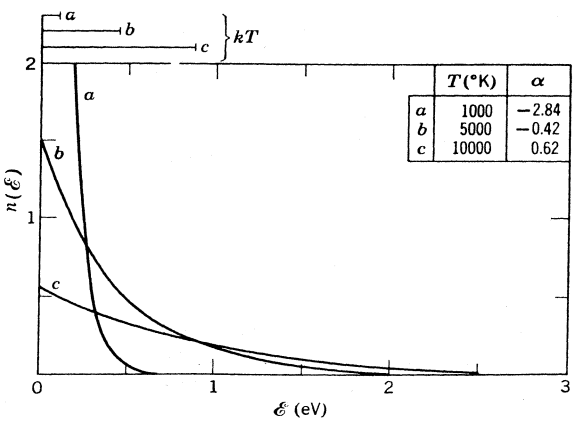


FIGURA 11-1
La función de distribución de Boltzmann en función de la energía para tres valores diferentes de T y α. Esta función es una exponencial pura que cae por un factor de $1/e$ con cada incremento kT en energía. En la parte superior de la figura se muestra la energía kT para cada temperatura. La figura ha sido dibujada para un sistema de partículas con la misma densidad que la utilizada en la figura 11-3. Al escoger la densidad, la α queda fija para cualquier temperatura T.

Asimismo, el parámetro α que aparece en la distribución de Bose para una T dada, se especifica por el número total de bosones en el sistema, y la distribución proporciona el número probable de bosones en el estado de energía $\mathscr{E}$. Las afirmaciones correspondientes a la distribución de Fermi, también son igualmente válidas.

En la figura 11-1 presentamos la gráfica de la función de distribución de Boltzmann en función de la energía para los tres valores diferentes de T y α. Nótese que esta distribución es una exponencial pura que cae por un factor $1/e$ con cada incremento kT en la energía $\mathscr{E}$, como se trató con cierta profundidad en el capítulo 1.

En la figura 11-2 se hace la gráfica de la distribución de Bose como función de la energía para tres valores diferentes de T y α. Se escoge $\alpha = 0$ en cada caso, de modo que $e^{\alpha} = 1$, caso que se aplica al gas de fotones que se estudiará más adelante. Obsérvese que para energías pequeñas comparadas con kT el número de partículas por estado cuántico es mayor en la distribución de Bose que en la distribución de Boltzmann. Esto es consecuencia de la presencia del término —1 en el denominador de la distribución de Bose. Sin embargo, para energías grandes comparadas con kT, la distribución tiende a la forma exponencial característica de la distribución de Boltzmann, ya que en este intervalo de valores, el factor exponencial en (11-22) es mucho mayor que el término —1. Esta es la región en la que el número promedio de partículas por estado cuántico es mucho menor que uno.

En la figura 11-3 se hace la gráfica de la distribución de Fermi como función de la energía, para cuatro valores diferentes de T y α. Debido a que en este caso se aplica el principio de exclusión, no se puede tener más de una partícula por estado cuántico. Esto justifica la forma tan diferente de las curvas a energías bajas, en comparación con las otras dos distribuciones, en las que no habrá restricción alguna para ocupación múltiple de los estados. Si se define la *energía de Fermi* como $\mathscr{E}_F = -\alpha kT$, de modo que $\alpha = -\mathscr{E}_F/kT$, (11-23) puede escribirse más convenientemente como

$$n_{\text{Fermi}}(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{(\mathscr{E}-\mathscr{E}_F)/kT} + 1} \tag{11-24}$$

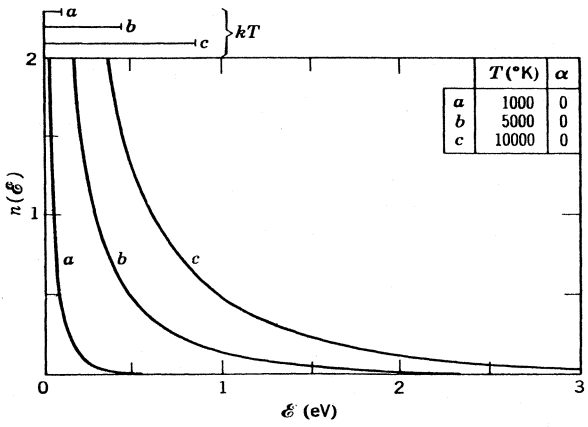


FIGURA 11-2

La distribución de Bose contra energía para tres valores diferentes de T, todos con $\alpha = 0$. Para energías grandes comparadas con kT esta función se aproxima a la forma exponencial de la distribución de Boltzmann, sin embargo, para energías pequeñas comparadas con kT excede los valores de Boltzmann, tendiendo al infinito cuando la energía tiende a cero. En la parte superior de la figura se muestra la energía kT para cada temperatura.

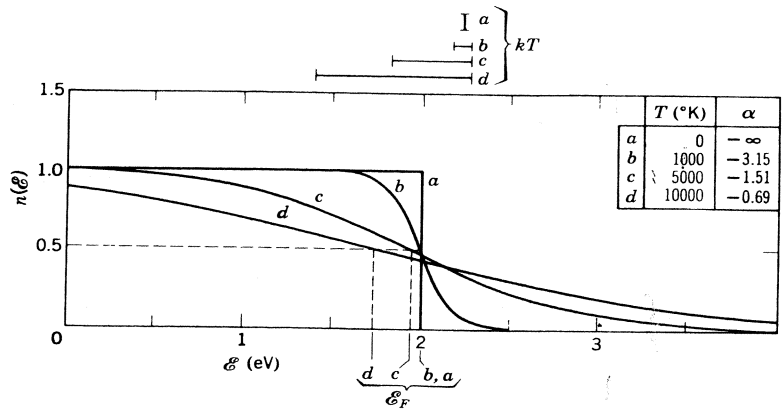


FIGURA 11-3

La función de distribución de Fermi para cuatro valores diferentes de T y α. El principio de exclusión fija un límite de una partícula por estado cuántico. En la parte inferior de la figura, se muestra la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$ para cada curva y la energía kT se muestra en la parte superior. La caída, que ocurre en una región de anchura kT con centro en $\mathscr{E}_F$, se vuelve más gradual al aumentar la temperatura. Para altas temperaturas y energías, esta función se aproxima a la función de distribución de Boltzmann. La figura ha sido dibujada para un material cuya densidad electrónica es similar a la del potasio y cuya energía de Fermi es de 2.1 eV. Al escogerse la densidad, tanto la energía de Fermi como α quedan fijas, a una temperatura dada.

Esto facilita la interpretación de la función de distribución. Por ejemplo, para estados con $\mathscr{E} \ll \mathscr{E}_F$ el término exponencial en la ecuación de arriba, es esencialmente cero para temperaturas bajas y $n_{\text{Fermi}} = 1$. Estos estados contienen un fermión. Para estados con $\mathscr{E} \gg \mathscr{E}_F$, la exponencial domina el denominador a bajas temperaturas y la distribución de Fermi se aproxima a la distribución de Boltzmann. Obsérvese que en esta región el número promedio de partículas, por estado cuántico es mucho menor que uno. Para $\mathscr{E} = \mathscr{E}_F$, el número promedio de partículas por estado cuántico, es exactamente igual a un medio, debido a la forma como se definió $\mathscr{E}_F$

Cuando $T = 0$, la distribución de Fermi da $n_{\text{Fermi}} = 1$ para todos los estados con energías por debajo de $\mathscr{E}_F$ y $n_{\text{Fermi}} = 0$ para los estados con energías mayores que $\mathscr{E}_F$. Por lo tanto, a $T = 0$ los estados de energía más bajos se llenan, empezando por el fondo y poniendo un fermión en cada uno de los estados sucesivamente más altos, hasta que el último fermión del sistema ocupa el estado de energía más alto en $\mathscr{E}_F$. Obviamente, esto minimiza el contenido de energía total del sistema como se esperaría a la temperatura de cero absoluto. Nótese de la figura 11-3 que para $T \ll \mathscr{E}_F/k$, $\mathscr{E}_F$ se encuentran a casi la misma energía que para $T = 0$. A estas temperaturas relativamente bajas, la energía térmica del sistema se consume en promover fermiones de estados de energía algo por debajo de la energía $\mathscr{E}_F$ correspondiente a temperaturas cero, a estados por arriba de esa energía. Los cambios de población se restringen a una región de anchura igual a kT, ya que kT es una medida del contenido de energía térmica por partícula del sistema. La falta de población debajo de la energía $\mathscr{E}_F$ correspondiente a temperatura cero, es bastante simétrica con la población por encima de esa energía a temperaturas pequeñas y, por lo tanto, $\mathscr{E}_F$ que siempre es la energía para la cual $n_{\text{Fermi}} = 0.5$, casi no cambia. Para temperaturas mayores $\mathscr{E}_F$ se corre hacia menores energías y esta simetría empieza a perderse.

Deben citarse ciertas características generales de las tres funciones de distribución. A energías altas ($\mathscr{E} \gg kT$) donde el número probable de partículas por estado cuántico para la

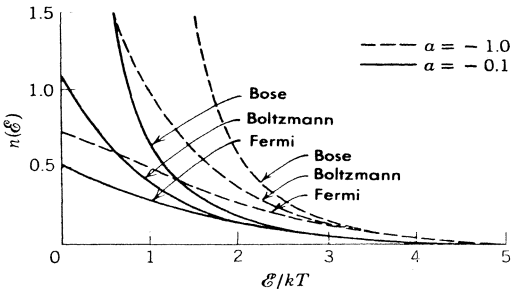


FIGURA 11-4
Gráficas de las funciones de distribución de Boltzmann, Bose y Fermi, contra $\mathscr{E}/kT$ para dos valores diferentes de α, -0.1 y -1.0. Debe hacerse notar que si las curvas punteadas se movieran hacia la izquierda, $(-0.1) - (-1.0) = 0.9$ unidades, coincidirían exactamente con las curvas sólidas. Esta observación puede esclarecer un poco más el significado físico de α.

distribución clásica, es mucho menor que uno, y la distribución cuántica se traslapa con la distribución clásica. Es decir, $n_{\text{Fermi}} \simeq n_{\text{Boltz}} \simeq n_{\text{Bose}}$, si $n_{\text{Boltz}} \ll 1$. A bajas energías ($\mathscr{E} \ll kT$) cuando este número es comparable o mayor que uno, las distribuciones cuánticas caen en lados opuestos de las distribuciones clásicas. Es decir, $n_{\text{Fermi}} < n_{\text{Boltz}} < n_{\text{Bose}}$, si $n_{\text{Boltz}} \gtrsim 1$. En la figura 14, se pueden ver fácilmente estas características, donde se grafican las tres funciones de distribución como función de la relación de energías $\mathscr{E}/kT$ y un mismo valor de α. Estas características son justamente las que se esperarían de las consideraciones de la

TABLA 11-1. Comparación de las tres funciones de distribución.

	Boltzmann	Bose	Fermi
Características básicas	Se aplica a las partículas distinguibles	Se aplica a partículas indistinguibles que no están sujetas al principio de exclusión	Se aplican a partículas indistinguibles que obedecen el principio de exclusión
Ejemplo de sistema	Partículas distinguibles, o aproximación a las distribuciones cuánticas cuando $\mathscr{E} \gg kT$	Bosones-partículas idénticas de spin cero o entero	Fermiones-partículas idénticas de spin semientero impar
Eigenfunciones de partículas	Sin requerimientos de simetría	Simétrica ante intercambio de marcas de las partículas	Antisimétrica ante intercambio de marcas de las partículas
Función de distribución	$Ae^{-\mathscr{E}/kT}$	$\dfrac{1}{e^{\alpha}e^{\mathscr{E}/kT} - 1}$	$\dfrac{1}{e^{(\mathscr{E}-\mathscr{E}_F)/kT} + 1}$
Comportamiento de la función de distribución como función de $\mathscr{E}/kT$	Exponencial	Para $\mathscr{E} \gg kT$, exponencial. Para $\mathscr{E} \ll kT$, queda por encima de Boltzmann	Para $\mathscr{E} \gg kT$, exponencial donde $\mathscr{E} \gg \mathscr{E}_F$ Si $\mathscr{E}_F \gg kT$, decrece abruptamente cerca de $\mathscr{E}_F$
Problemas específicos a los que se aplica en este capítulo	Gases a esencialmente cualquier temperatura; modos de vibración en un sistema cerrado isotérmico	Gas de fotones (radiación por una cavidad); gas de fonones (capacidad calorífica); Helio líquido	Gas de electrones (calor específico electrónico, potencial de contacto, emisión termiónica).

sección 11-2. Cuando $n_{\text{Boltz}} \ll 1$ habría poca oportunidad de que se manifestasen los efectos de la indistinguibilidad ya que la probabilidad de encontrar dos partículas en el mismo estado cuántico es de por sí muy pequeña. Por esta razón, es de esperarse que las distribuciones cuánticas que se aproximen a la distribución clásica, para $n_{\text{Boltz}} \ll 1$. Cuando la distribución clásica predice una probabilidad apreciable de que haya más de una partícula por estado cuántico, es decir, cuando $n_{\text{Boltz}} \gtrsim 1$, entonces, esta probabilidad sería inhibitoria para fermiones y aumentada para bosones, y se esperará que las distribuciones cuánticas diverjan de las distribuciones clásicas en la forma indicada en la figura 11-4. En la tabla 11-1 se resumen los atributos más importantes de las tres funciones de distribución.

11.5 El calor específico de un sólido cristalino.

En esta sección se presenta el primero de varios ejemplos de aplicación de la distribución de Boltzmann a sistemas *cuánticos*. En los experimentos preliminares de Dulong y Petit, se encontró que el calor específico de un sólido (a temperatura ambiente) es muy similar para muchos materiales, aproximadamente 6 cal/mol–°K. Es decir, la cantidad de energía calorífica necesaria por molécula para aumentar la temperatura del sólido una cantidad dada, parecía ser aproximadamente la misma, independientemente del elemento químico de que estuviera compuesto. En ese tiempo, este resultado podía ser interpretado en base a las siguientes ideas de la estadística clásica: existen N_0, el número de Avogadro, átomos en un mol. Se considera que cada átomo lleva a cabo oscilaciones armónico-simples en torno a su posición en la red, en tres dimensiones; de modo que un mol del sólido tiene $3N_0$ grados de libertad. A cada grado de libertad se le asigna una energía total promedio kT, de acuerdo con la ley clásica de la equipartición de la energía, de modo que

$$E = 3N_0kT = 3RT$$

donde R es la constante universal de los gases. Entonces, la capacidad calorífica a volumen constante es

$$c_v = \frac{dE}{dT} = 3R = 6 \text{ cal/mol-°K}$$

Este resultado es conocido como ley de *Dulong y Petit*.

Sin embargo, experimentos posteriores demostraron que a medida que se disminuye la temperatura, las capacidades caloríficas molares varían. De hecho, el calor específico de todos los sólidos tiende a cero cuando disminuye la temperatura y cerca del cero absoluto, el calor específico varía como T^3. Eistein fue quien vio que el factor kT de la equipartición clásica, tenía que ser sustituido por otro factor que tomara en cuenta la cuantización de la energía de un oscilador armónico simple, muy parecido al modo como Planck atacó el problema de la radiación por una cavidad. Representó el sólido como una colección de $3N_0$ osciladores armónicos de la misma frecuencia fundamental y sustituyó kT por el resultado $h\nu/(e^{h\nu/kT} - 1)$ de (1-26), que se obtuvo de combinar la cuantización de la energía de Planck y la distribución de Boltzmann. Asi, encontró

$$E = \frac{3N_0h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = 3RT\,\frac{h\nu/kT}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{11-25}$$

De lo anterior calculó el calor específico como $c_v = dE/dT$ y encontró una concordancia cualitativa con los resultados experimentales a temperaturas razonablemente bajas. A pesar de que todas las sustancias presentan curvas de c_v en función de T de la misma forma, debe escogerse una frecuencia característica ν diferente para cada sustancia, con el fin de obtener

correspondencia con los resultados experimentales. Además, a temperaturas muy bajas, la fórmula de Einstein no contiene la dependencia con la temperatura T^3 que requieren los resultados experimentales.

Peter Debye, de modo simple y general encontró el tratamiento teórico que con buen éxito reproduce exactamente los resultados experimentales. Los tratamientos anteriores consideraban los átomos del sólido como si vibraran independientemente entre sí. En realidad, los átomos están fuertemente acoplados. En lugar de considerar N_0 átomos vibrando independientemente en tres dimensiones se debería considerar un sistema de $3N_0$ vibraciones acopladas. Un problema dinámico tal no sólo sería difícil de manejar directamente, sino que, como los átomos interactúan fuertemente, no se podría utilizar la estadística de partículas sin interacción. Sin embargo, Debye hizo ver que una superposición de modos elásticos de vibración longitudinal del sólido como un todo (cada modo independiente de los demás como los modos independientes de dos péndulos acoplados) proporciona los mismos movimientos atómicos individuales que el acoplamiento real. Las vibraciones térmicas de los átomos del sólido son equivalentes a una combinación grande de ondas elásticas estacionarias en un gran intervalo de frecuencias. Las vibraciones atómicas de una red cristalina aparecen como vibraciones elásticas macroscópicas del cristal como un todo. El problema sigue siendo la determinación del espectro de frecuencias de los modos elásticos de vibración longitudinal. De allí en adelante, cada modo se puede considerar como un oscilador armónico independiente, cuyos eigenvalores cuantizados ya son conocidos. Entonces, sumando se puede obtener la energía total del sistema.

Antes de realizar el cálculo, es necesario puntualizar que la distribución de Boltzmann *si* es aplicable en este caso. Los átomos individuales, en la formulación original del problema, se pueden considerar como partículas *distinguibles;* los átomos se distinguen entre sí por su *posición en el espacio* en los sitios de la red del cristal. Sin embargo, la suposición de las formulaciones anteriores, a saber, que estas partículas no interactúan, está claramente equivocada. En el modelo de Debye, los átomos se sustituyen por modos elásticos de vibración del sólido como un todo. Estos son elementos independientes sin interacción, es decir, osciladores armónicos independientes. Además, estos elementos *son* distinguibles entre sí, ya que cada modo de vibración (onda estacionaria) está caracterizado por un conjunto diferente de números (n_x,n_y,n_z) que esencialmente corresponden a un número diferente de nodos para cada modo de vibración. Ningún par de modos de vibración puede tener conjuntos iguales de estos números.

Debye supuso que el sólido se comporta como un cuerpo tridimensional, elástico y continuo, con el fin de obtener el espectro de frecuencias de los modos de vibración, con los modos permitidos correspondiendo a vibraciones longitudinales con nodos en las fronteras. En principio, esto es idéntico al cálculo de los nodos de vibración de ondas electromagnéticas en una cavidad, que se consideró en la sección 1-3. Por lo tanto, el número de modos con frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$ es

$$N(\nu)\,d\nu = \frac{4\pi V}{v^3}\,\nu^2\,d\nu \tag{11-26}$$

donde v es la velocidad de ondas elásticas y V el volumen del sólido. Esto es idéntico a (1-12), excepto que v sustituye a c, y se elimina un factor de 2 ya que, con ondas longitudinales en lugar de transversales, no se tienen dos estados de polarización. Además, Debye supuso que el número de modos está limitado a $3N_0$ por mol, es decir, el número de grados de libertad traslacionales de los N_0 átomos, para tomar en cuenta la naturaleza atómica real de un sólido cristalino. Entonces, los modos permitidos varían en frencuencia, desde cero hasta algún máximo ν_m. Para obtener ν_m Debye igualó

$$\int_0^{\nu_m} N(\nu)\,d\nu = 3N_0$$

obteniendo

$$\frac{4\pi V}{3v^3}\nu_m^3 = 3N_0 \tag{11-27a}$$

o bien,

$$\nu_m = v\left(\frac{9N_0}{4\pi V}\right)^{1/3} \tag{11-27b}$$

Ahora, si cada modo es tratado como un oscilador unidimensional de energía promedio $\bar{\mathscr{E}}$ dada por la cuantización de Planck y la distribución de Boltzmann,

$$\bar{\mathscr{E}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

entonces, la energía elástica total del sólido será

$$E = \int_0^{\nu_m} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}\frac{4\pi V}{v^3}\nu^2\, d\nu \tag{11-28}$$

Esta expresión se puede escribir en una forma más condensada, cambiando una variable de integración adimensional $x = h\nu/kT$ de modo que, $x_m = h\nu_m/kT$. Entonces

$$E = \frac{4\pi V}{v^3}\int_0^{\nu_m}\frac{h\nu^3\, d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{4\pi V}{v^3}\left(\frac{kT}{h}\right)^4 h\int_0^{x_m}\frac{x^3\, dx}{e^x - 1}$$

y, al sustituir $4\pi V/v^3 = 9N_0/\nu_m^3$ rearreglando términos, se obtiene la fórmula de Debye

$$E = 3RT\frac{3}{x_m^3}\int_0^{x_m}\frac{x^3\, dx}{e^x - 1} \tag{11-29}$$

Como x es una cantidad adimensional, $h\nu_m/k$ tiene las dimensiones de temperatura y generalmente se conoce como *temperatura característica de Debye*, Θ, de la sustancia de que se trate. Entonces, con $x_m = \Theta/T$, (11-29) quedará como

$$E = 9R\frac{T^4}{\Theta^3}\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3}{e^x - 1}\, dx \tag{11-30}$$

y la *fórmula de Debye para el calor específico de un sólido es*

$$c_v = \frac{dE}{dT} = 9R\left[4\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\int_0^{\Theta/T}\frac{x^3}{e^x - 1}\, dx - \frac{\Theta}{T}\frac{1}{e^{\Theta/T} - 1}\right] \tag{11-31}$$

Como se verá en el ejemplo 11-2, la teoría de Debye implica un parámetro Θ que, por su relación con las propiedades elásticas del sólido, puede determinarse independientemente de las medidas de calor específico. Utilizando estos valores determinados independientemente se obtiene una gran concordancia con las medidas experimentales del calor específico, que se ilustran en la figura 11-5. En particular, la teoría concuerda con la ley observada de T^3 a muy bajas temperaturas.

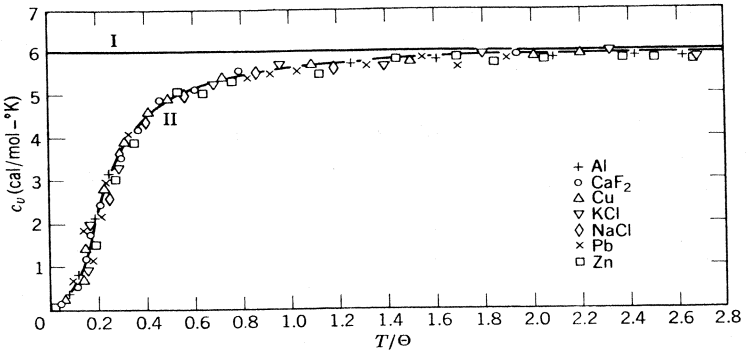


FIGURA 11-5
Calor específico medido a volumen constante, como función de la temperatura para varios materiales. La línea horizontal I representa la ley de Dulong-Petit, mientras que la curva II representa las predicciones de la teoría de Debye.

Ejemplo 11-2 (a) Demostrar cómo Θ se puede obtener directamente de las propiedades elásticas del sólido.

Como $\Theta = h\nu_m/k$ en primer lugar se deberá encontrar ν_m. A partir de (11-27b), $\nu_m = v\,(9N_0/4\pi V)^{1/3}$ de modo que $\Theta = (hv/k)(9N_0/4\pi V)^{1/3}$. Todas las cantidades involucradas se pueden medir experimentalmente de modo que Θ puede determinarse de medidas de V (volumen molar) y v (velocidad de las ondas elásticas).

En realidad, como un sólido puede transmitir tanto ondas longitudinales (de compresión), como transversales (de corte), y como sus velocidades son diferentes, se sustituye v por una expresión más general. En particular, si v_l representa la velocidad de ondas longitudinales en el sólido, y v_t la velocidad de ondas transversales, se requiere $3N_0 = (4\pi V/3v_l^3)\nu_m^3 + (4\pi V/3v_t^3)2\nu_m^3$ en lugar de (11-27a), donde se toman en cuenta los dos estados de polarización de las ondas transversales.
Por lo tanto, en (11-27b) se utiliza

$$\frac{1}{v^3} = \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3}\right)$$

De medidas de v_l y v_t, se calcula v Algunos valores calculados de Θ y ν_m son:

Fierro	$\Theta = 465°K$	$\nu_m = 9.7 \times 10^{12}\,seg^{-1}$
Aluminio	$\Theta = 395°K$	$\nu_m = 8.3 \times 10^{12}\,seg^{-1}$
Plata	$\Theta = 210°K$	$\nu_m = 4.4 \times 10^{12}\,seg^{-1}$

(b) Demostrar que cuando $T \to 0$, $c_v \to \text{const} \times T^3$ en la fórmula de Debye (11-31).
Se tiene

$$c_v = 9R\left[4\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1}\,dx - \frac{\Theta}{T}\frac{1}{e^{\Theta/T} - 1}\right]$$

A medida que T disminuye, Θ/T se hace muy grande. En efecto, cuando $T \to 0$, $\Theta/T \to \infty$, y el último término se anula. Por lo tanto,

$$c_v \to 9R4\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1}\,dx$$

pero, como $\int_0^\infty x^3/(e^x - 1)\,dx = \pi^4/15$, se obtiene

$$c_v = \frac{12\pi^4}{5}\frac{R}{\Theta^3}T^3$$

que es la ley de T^3 que se buscaba, para muy bajas temperaturas. (c) Demostrar cómo se obtiene Θ a partir de medidas del calor específico.
Si $T = \Theta$, de (11-31) se obtiene

$$c_v = 9R\left[4\int_0^1 \frac{x^3}{e^x - 1}\,dx - \frac{1}{e - 1}\right] = 2.856R = 5.67 \text{ cal/mol-°K}$$

de modo que la temperatura de Debye se puede definir como aquella temperatura para la cual $c_v = 2.856R$. Para una comparación con la parte (a), los valores que se obtienen son 455°K para fierro, 420°K para aluminio y 215°K para plata. ◀

Es sorprendente cómo un modelo tan simple como el de Debye proporciona resultados tan excelentes. El espectro de frecuencia real de los modos de vibración debería depender de la estructura real de la red del sólido cristalino y podría diferir de los resultados del modelo continuo de Debye. Esas diferencias, como las que de hecho se han encontrado entre el experimento y las predicciones de Debye, se pueden explicar por las diferencias esperadas entre el espectro real y el de Debye por lo que los hechos experimentales respecto de los calores específicos, parecen estar completamente comprendidos. Hasta aquí, se han considerado solamente las contribuciones de las vibraciones de la red al calor específico de un sólido. En la sección 11-11, se considerarán las contribuciones aportadas por los electrones libres al calor específico de un sólido conductor.

11.6 La distribución de Boltzmann como una aproximación a las distribuciones cuánticas.

Ya se ha visto que cuando el número promedio de partículas por estado cuántico es mucho menor que uno, las distribuciones cuánticas convergen a las distribuciones clásicas. En esta región, es particularmente útil el *factor de Boltzmann*

$$\frac{n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E}_2)}{n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E}_1)} = e^{-(\mathscr{E}_2 - \mathscr{E}_1)/kT} \tag{11-32}$$

que proporciona el número relativo de partículas por estado cuántico con dos energías diferentes $\mathscr{E}_1$ y $\mathscr{E}_2$, para un sistema en equilibrio térmico a temperatura T. Esta aproximación ya ha sido utilizada anteriormente, en el ejemplo 4-7. Se puede aplicar a todos los sistemas cuánticos a energías de varios kT por encima del estado base (los estados están tan escasamente ocupados que n_{Boltz} es mucho menor que uno). Por ejemplo, cuando se consideran colisiones térmicas de un gas en equilibrio a una temperatura T los estados excitados de los átomos se encuentran normalmente escasamente poblados. Por lo tanto, utilizando el factor de Boltzmann, se pueden obtener las poblaciones relativas en equilibrio de los diversos estados excitados como función de la temperatura. Como las intensidades de las líneas espectrales dependen de estas poblaciones, se pueden predecir las variaciones de las intensidades espectrales con la temperatura. Muy frecuentemente, el procedimiento se invierte; es decir, empezando con las intensidades relativas conocidas, se puede determinar la temperatura de la fuente, como en el caso de la estrella que se consideró en el ejemplo 4-7. Como se verá en el capítulo 12 la misma idea se aplica a los espectros moleculares.

La distribución de velocidades de Maxwell de las moléculas de un gas que se mueven libremente dentro de una caja, puede ser válidamente deducida de la distribución de Boltzmann, porque n_{Boltz} para todos los estados de partículas libre es muy pequeña en las condiciones que usualmente existen en la naturaleza de los gases ordinarios.

Ejemplo 11-3. La *resonancia magnética nuclear*, es una técnica utilizada para obtener información acerca de los campos magnéticos internos en sólidos. Es más sensible que las técnicas químicas, por ejemplo, en la identificación de impurezas magnéticas en un cristal. Sin embargo, principalmente permite utilizar el núcleo como una sonda para obtener información respecto a los sólidos, de manera similar como los trazados radiactivos son utilizados en sistemas biológicos. Para núcleos con spin diferente de cero, la degeneración de los niveles de energía con respecto al spin nuclear, es eliminada por el campo magnético, (de modo análogo al efecto Zeeman). La absorción resonante de potencia electromagnética ocurre cuando los fotones que bombardean un sólido tienen la energía apropiada para excitar transiciones entre estos niveles. La intensidad de la absorción depende de la diferencia en poblaciones de los niveles implicados. Para ilustrar la sensibilidad de la técnica, utilizar el factor de Boltzmann para calcular la diferencia entre las poblaciones, n_1 y n_2 de los dos niveles a temperatura ambiente, si la absorción resonante se detecta a una frecuencia de 10 MHz.

El factor de Boltzmann es

$$\frac{n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E}_2)}{n_{\text{Boltz}}(\mathscr{E}_1)} = e^{-(\mathscr{E}_2-\mathscr{E}_1)/kT} = \frac{n_2}{n_1}$$

se tiene $T = 300°\text{K}$, $\mathscr{E}_2 - \mathscr{E}_1 = h\nu$, y $\nu = 10^7\ \text{seg}^{-1}$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned}\frac{n_2}{n_1} &= e^{-h\nu/kT} \\ &= e^{-6.6\times10^{-34}\text{joule-seg}\times10^{7}\text{seg}^{-1}/1.4\times10^{-23}\text{joule-}°\text{K}^{-1}\times300°\text{K}} \\ &= e^{-1.6\times10^{-6}} \simeq 1 - 1.6 \times 10^{-6}\end{aligned}$$

En consecuencia,

$$1 - \frac{n_2}{n_1} = 1.6 \times 10^{-6}$$

o bien,

$$\frac{n_1 - n_2}{n_1} = 1.6 \times 10^{-6}$$

Por lo tanto, se puede detectar una diferencia en las poblaciones de dos partes en un millón, resultado que revela la alta sensibilidad de la técnica de NMR. El factor de Boltzmann es aplicable en este caso ya que la población se distribuye sobre varios niveles muy próximos, de modo que tanto n_1 como n_2 son pequeños. ◀

11.7 El laser

En la sección anterior se ha visto que el número relativo de partículas por estado cuántico, a dos energías diferentes, para un sistema en equilibrio térmico a temperatura T está dado, bajo ciertas circunstancias, por el factor de Boltzmann $e^{-(\mathscr{E}_2-\mathscr{E}_1)/kT}$. Enseguida se utilizará este resultado para explicar el funcionamiento de un dispositivo muy importante conocido como *laser*, acróstico por "*amplificación de luz por la emisión estimulada de radiación*". Un *maser* es el sistema correspondiente que opera en la región de microondas del espectro electromagnético.

Consideremos transiciones entre dos estados de energía de un átomo en presencia de un campo electromagnético. En la figura 11-6 se ilustran esquemáticamente los tres procesos de

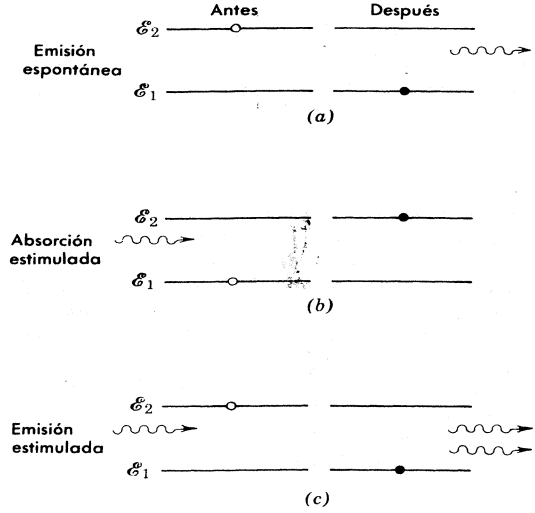


FIGURA 11-6
Se ilustra (a) el proceso de emisión espontánea, (b) el proceso de absorción estimulada, y (c) el proceso de emisión estimulada, para dos niveles de energía de un átomo.

transición, a saber, *emisión espontánea, absorción estimulada y emisión estimulada.* En el proceso de emisión espontánea, el átomo se encuentra inicialmente en el estado superior de energía $\mathscr{E}_2$ y decae al nivel inferior de energía $\mathscr{E}_1$ por la emisión de un fotón de frecuencia $\nu = (\mathscr{E}_2 - \mathscr{E}_1)/h$. (La vida media de un átomo en la mayoría de los estados excitados es 10^{-8} seg. Sin embargo, algunos decaimientos pueden ser mas lentos y entonces los estados excitados se llaman metaestables; en esos casos la vida media puede ser tan larga como 10^{-3} seg). En el proceso de absorción estimulada el átomo es estimulado por un fotón de frecuencia ν, de un campo electromagnético aplicado al átomo, que induce una transición del estado de baja energía al de alta energía, en tanto que un fotón es absorbido por el átomo. En el proceso de una emisión estimulada, un fotón de frecuencia ν estimula al átomo para que realice una transición del estado de alta energía al estado de baja energía. El átomo se queda en este estado más bajo, mientras que emergen dos fotones, el incidente y el emitido.

Los procesos de absorción y emisión estimulada de energía electromagnética en sistemas cuánticos puede considerarse como análogos a la absorción o emisión estimulada de energía mecánica en sistemas clásicos resonantes sobre los cuales se ejerce una fuerza mecánica periódica de la misma frecuencia que la frecuencia natural del sistema. En esos sistemas mecánicos, se puede agregar o restar energía dependiendo de las fases relativas del movimiento del sistema y de la fuerza ejercida. Sin embargo, el proceso de emisión espontánea, en un efecto estrictamente cuántico. Como se analizó en la sección 8-7, la electrodinámica cuántica demuestra que existen fluctuaciones en el campo electromagnético. Debido a la energía del punto cero del campo electromagnético, estas fluctuaciones ocurren aún cuando clásicamente no hay campo. Estas fluctuaciones son las que inducen la llamada emisión espontánea de radiación por átomos en estados excitados. Por lo tanto, en los tres procesos se trata de la interacción de radiación con el átomo.

Enseguida se mostrará cómo se relacionan estos procesos cuantitativamente. Sea $\rho(\nu)$ la densidad espectral de radiación electromagnética aplicada a los átomos. Considérese que existen n_1 átomos en un estado de energía $\mathscr{E}_1$ y n_2 en un estado $\mathscr{E}_2$, donde $\mathscr{E}_2 > \mathscr{E}_1$. La probabilidad por átomo por unidad de tiempo (o razón de transición por átomo) de que un átomo en un estado 1 lleve a cabo una transición al estado 2 (absorción estimulada) será claramente proporcional a la densidad de energía $\rho(\nu)$ de la radiación aplicada a la frecuencia $\nu = (\mathscr{E}_2 - \mathscr{E}_1)/h$. En la sección 8-7 se argumentó que la razón de transición para emisión estimulada

también es proporcional a $\rho(\nu)$. Sin embargo, como se explicó en la sección 8-7, la razón de transición para emisión espontánea no contiene a $\rho(\nu)$ ya que el proceso no involucra el campo electromagnético aplicado.

Las razones de transición también dependen de las propiedades detalladas de los estados atómicos 1 y 2 a través del elemento de matriz del momento dipolar eléctrico de (8-42). Por lo tanto, la probabilidad por unidad de tiempo para una transición del estado 1 al estado 2 se puede escribir como

$$R_{1\to 2} = B_{12}\rho(\nu) \tag{11-33}$$

en donde B_{12} es un coeficiente que incluye la dependencia con propiedades de los estados 1 y 2. La probabilidad por unidad de tiempo de que un átomo en el estado 2 realice una transición al estado 1, es la suma de dos términos; la probabilidad por unidad de tiempo A_{21} de emisión espontánea y la probabilidad por unidad de tiempo $B_{21}\rho(\nu)$ de emisión estimulada. Una vez más, A_{21} y B_{21} son coeficientes cuyos valores dependen de las propiedades de los estados 1 y 2, a través de los elementos de matriz apropiados. Por lo tanto,

$$R_{2\to 1} = A_{21} + B_{21}\rho(\nu) \tag{11-34}$$

Obsérvese otra vez que la emisión espontánea ocurre a una razón independiente de $\rho(\nu)$, mientras que la emisión estimulada ocurre a una razón proporcional a $\rho(\nu)$.

Si ahora se considera que los n_1 átomos en el estado 1 y los n_2 átomos en el estado 2 están en equilibrio térmico a una temperatura T con el campo de radiación de densidad de energía $\rho(\nu)$, entonces, la razón total de absorción para el sistema $n_1R_{1\to 2}$ y la razón de emisión total $n_2R_{2\to 1}$ deben ser iguales, como en (11-4). Es decir,

$$n_1R_{1\to 2} = n_2R_{2\to 1} \tag{11-35}$$

Por lo tanto, se obtiene

$$n_1B_{12}\rho(\nu) = n_2[A_{21} + B_{21}\rho(\nu)]$$

Resolviendo esta ecuación para $\rho(\nu)$ se obtiene,

$$\rho(\nu) = \frac{\dfrac{A_{21}}{B_{21}}}{\dfrac{n_1}{n_2}\dfrac{B_{12}}{B_{21}} - 1} \tag{11-36}$$

Enseguida, se supone que se puede utilizar el factor de Boltzmann, (11-32), con $h\nu = \mathscr{E}_2 - \mathscr{E}_1$, para obtener

$$\frac{n_1}{n_2} = e^{(\mathscr{E}_2-\mathscr{E}_1)/kT} = e^{h\nu/kT}$$

de modo que (11-36) se convierte en:

$$\rho(\nu) = \frac{\dfrac{A_{21}}{B_{21}}}{\dfrac{B_{12}}{B_{21}}e^{h\nu/kT} - 1} \tag{11-37}$$

Esta ecuación que proporciona la densidad de energía espectral de radiación de frecuencia ν que se encuentra en equilibrio térmico a temperatura T con átomos de energía $\mathscr{E}_1$ y $\mathscr{E}_2$, debe concordar con el espectro del cuerpo negro de Planck, (1-29)

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left(\frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}\right)$$

Por lo tanto, se concluye que

$$\frac{B_{12}}{B_{21}} = 1 \tag{11-38}$$

y

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \tag{11-39}$$

Estos resultados fueron obtenidos por primera vez en 1917 por Einstein, y por lo tanto son llamados *coeficientes A y B de Einstein*. Nótese que el argumento no proporciona valores de los coeficientes, sino solo sus razones. Sin embargo, si se calcula el coeficiente de emisión espontánea A_{21} a partir de mecánica cuántica utilizando las técnicas de la sección 8-7, de estas fórmulas se pueden obtener los demás coeficientes.

Hay mucho de interés físico en lo anterior. Por una parte de (11-38), se encuentra que los coeficientes de absorción estimulada y emisión estimulada, son iguales. Por otra parte se puede ver de (11-39) que la relación del coeficiente de emisión espontánea al coeficiente de emisión estimulada varía con la frecuencia como ν^3. Esto quiere decir, por ejemplo que entre mayor es la diferencia de energía entre los dos estados, más probable es la emisión espontánea comparada con la emisión estimulada. La ecuación (8-43) muestra que ν^3 está presente en estas relaciones porque A_{21} intrínsecamente es proporcional a ν^3. Otro resultado que se puede obtener es la relación entre la probabilidad de emisión espontánea A_{21} y la probabilidad de emisión estimulada $B_{21}\rho(\nu)$ es decir,

$$\frac{A_{21}}{B_{21}\rho(\nu)} = e^{h\nu/kT} - 1 \tag{11-40}$$

Esto demuestra que, para átomos en equilibrio térmico con la radiación, la emisión espontánea es mucho más probable que la emisión estimulada si $h\nu \gg kT$. Como esta condición se aplica a transiciones electrónicas en átomos y moléculas, la emisión estimulada se puede ignorar en esas transiciones. Sin embargo, la emisión estimulada puede volverse significativa si $h\nu \simeq kT$, y puede ser dominante si $h\nu \ll kT$, condición que se aplica a temperatura ambiente, a transiciones atómicas en la región del espectro correspondiente a microondas donde ν es relativamente muy pequeña.

Ahora si, ya se está en condiciones de poder entender el concepto implícito del laser y del maser. En general, la relación entre la razón de emisión y la razón absorción se puede escribir como $n_2R_{2\to1}/n_1R_{1\to2}$ o bien,

$$\frac{\text{razón de emisión}}{\text{razón de absorción}} = \frac{n_2A_{21} + n_2B_{21}\rho(\nu)}{n_1B_{12}\rho(\nu)}$$

$$= \left[1 + \frac{A_{21}}{B_{21}\rho(\nu)}\right]\frac{n_2}{n_1} \tag{11-41}$$

Si se tienen estados de energía tales que $\mathscr{E}_2 - \mathscr{E}_1 \ll kT$, o $h\nu \ll kT$, entonces (11-40) demuestra que se puede ignorar el segundo término en el paréntesis por ser mucho menor que uno, y se obtiene

$$\frac{\text{razón de emisión}}{\text{razón de absorción}} \simeq \frac{n_2}{n_1} \tag{11-42}$$

Este resultado es general en el sentido de que no se ha supuesto una situación de equilibrio. En casos de equilibrio térmico, donde el factor de Boltzmann es aplicable, se espera que $n_2 < n_1$. Sin embargo, en condiciones fuera de equilibrio, en principio cualquier relación es posible. Si ahora, por algún artificio, se invirtiese la población normal de los estados de modo que $n_2 > n_1$, entonces la razón de emisión excedería la razón de absorción. Esto quiere decir que la radiación aplicada de frecuencia $\nu = (\mathscr{E}_2 - \mathscr{E}_1)/h$ será *amplificada* en intensidad por el proceso de interacción, ya que emerge más de dicha radiación que la que entra.

Desde luego que dichos procesos reducirán la población del estado más alto hasta que el equilibrio se restablezca. Por lo tanto, para sostener el proceso, es necesario utilizar algún método que mantenga la *inversión de población* de los estados. Los dispositivos que realizan ésto, son llamados laser y maser, dependiendo de la región del espectro electromagnético en la que operan. Se debe suministrar energía al sistema mediante un método llamado *bombeo óptico* que será descrito más adelante, y lo que se obtiene es un haz de radiación intensa, coherente y monocromática, como se explica enseguida.

En las fuentes de luz atómica ordinarias, existe una relación aleatoria entre las fases de los fotones emitidos por átomos diferentes, por lo que la radiación resultante es incoherente. La razón es que no existe correlación en los tiempos en los que los átomos realizan sus transiciones. Por otra parte, en fuentes de luz laser los átomos radían en fase con la radiación inductora, ya que sus oscilaciones de carga se encuentran en fase con esa radiación. Como en el laser, la radiación inductora es un haz paralelo coherente que se forma por la reflexión en los dos extremos de una celda resonante, los fotones se encuentran todos en fase y actúan *coherentemente*. La intensidad resultante, que es el cuadrado en las amplitudes combinadas constructivamente resulta correspondientemente alta. Los estados entre los cuales se realizan las transiciones son un estado superior metaestable, cuya vida larga le permite estar altamente poblado, y el nivel inferior correspondiente al estado base de vida infinitamente larga. De la relación de incertidumbre $\Delta E\, \Delta t \simeq h$, si Δt es igual a la vida del estado superior, se concluye que la incertidumbre en la diferencia de energías de los estados es pequeña, y la frecuencia de la transición correspondiente a la emisión, está bien definida, lo que produce un haz altamente *monocromático*. En los dispositivos prácticos el haz también es unidireccional, ya que la propiedad de coherencia le permite obtener esencialmente una colimación o enfoque perfectos. Esto aumenta aún más la concentración de la densidad de energía. El hecho de que un laser con menor potencia que un foco de luz típico, pueda producir un agujero en una placa metálica, es una indicación de la concentración de la energía en el laser.

En el laser de estado sólido, que opera con un cristal de rubí, algunos de los átomos de Al en la molécula de Al_2O_3 son sustituídos por átomos de Cr. Estos átomos de cromo como "impurezas" son las causas de la acción laser. En la figura 11-7 se muestra una versión simplificada del esquema apropiado de niveles de energía del cromo. (En realidad, el nivel más alto es un multiplete). El nivel de energía $\mathscr{E}_1$ es el estado base, y el nivel de energía $\mathscr{E}_3$ es el estado inestable de vida media corta ($\simeq 10^{-8}$ seg), de modo que la diferencia de energías $\mathscr{E}_3 - \mathscr{E}_1$ corresponde a una longitud de onda de aproximadamente 5500 Å. El nivel es un estado excitado intermedio que es metaestable, su vida media ante decaimiento espontáneo es aproximadamente 3×10^{-3} seg. Si los átomos de cromo están en equilibrio térmico, los números de población de los estados son tales que $n_3 < n_2 < n_1$. Sin embargo, si se bombea con radiación de 5500 Å, se induce la absorción de los fotones incidentes por los átomos de cromo en el estado base, aumentando de esa forma, el número de población del estado de energía $\mathscr{E}_3$ vaciando el estado

de energía $\mathscr{E}_1$. La emisión espontánea que resulta cuando los átomos pasan del estado 3 al estado 2, produce un aumento en la población del estado 2, que tiene una vida media relativamente larga. El resultado de este bombeo óptico es disminuir n_1 y aumentar n_2, de modo que $n_2 > n_1$ y existe una inversión de población. Ahora bien, cuando un átomo realice la transición del estado 2 al estado 1, el fotón emitido de 6943 Å estimulará otras transiciones. La emisión estimulada dominará la absorción estimulada (porque $n_2 > n_1$) y la salida de fotones de longitud de onda 6943 Å aumenta considerablemente. Se obtiene un haz monocromático, coherente e intenso.

En la práctica, el laser de rubí es una barra cilíndrica con extremos paralelos, ópticamente planos y reflejantes, uno de los cuales sólo es parcialmente reflejante, como se muestra en la figura 11-7. Aquellos fotones emitidos que no se propagan a lo largo del eje, escapan por los lados sin ocasionar mucha emisión estimulada, sin embargo, aquellos fotones que se mueven exactamente en la dirección del eje, son reflejados varias veces, de modo que son capaces de

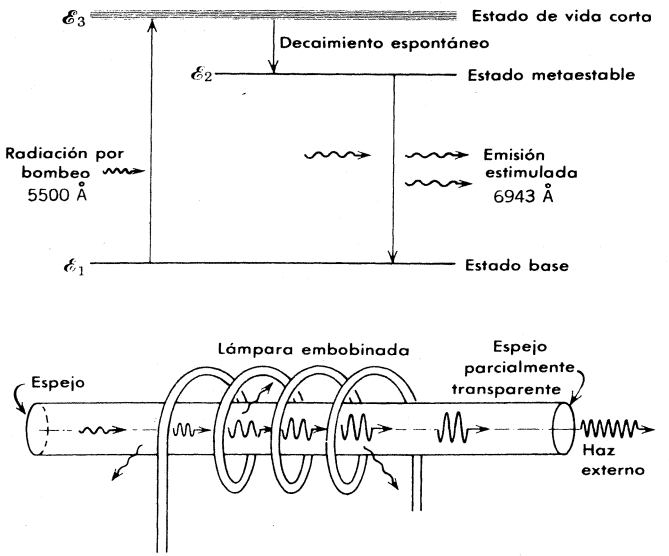


FIGURA 11-7

Arriba: Niveles de energía relevantes del cromo en un laser de rubí. El estado 3 es muy ancho (ΔE grande) porque es de vida corta (Δt pequeña). El estado 2 es muy estrecho (ΔE pequeña) porque es de vida larga (Δt grande). El bombeo óptico sube al átomo de su estado base 1 al estado excitado 3, en donde la anchura de este último nivel facilita el proceso. Entonces, ocurre un decaimiento espontáneo al nivel 2 y la energía liberada generalmente se convierte en energía mecánica del cristal de rubí, en lugar de radiación de fotones. Finalmente, el estado 2 decae al estado base, ya sea por emisión espontánea o por emisión estimulada debida a otros fotones de otras transiciones semejantes. Como el estado 2 es muy estrecho por definición y el estado base es infinitamente estrecho, esta radiación es muy monocromática. *Abajo:* Esquema de un laser de rubí que muestra la lámpara de bombeo óptico, el escape de fotones que no se mueven a lo largo del eje, sugiriendo la acumulación de los fotones que sí se mueven a lo largo del eje y que por reflexiones sucesivas estimularán aún más la emisión, indicando también el escape de una fracción de los fotones axiales a través del espejo parcialmente reflejante colocado en un extremo.

estimular la emisión varias veces. Por lo tanto, el número de fotones crece rápidamente, de manera que aquellos que escapan por el extremo parcialmente reflector, producen un haz unidireccional de gran intensidad y longitud de onda definida con gran precisión.

Obsérvese que lo anterior es una reminiscencia de la conclusión de la sección 11-2, en el sentido de que n bosones que se encuentren en un estado cuántico, aumentarán la probabilidad de que uno más se les una por un factor de $(1 + n)$. Esta conclusión es aplicable a los fotones en los estados cuánticos de la barra cilíndrica, ya que los fotones son bosones. Aplicando la distribución de Bose a los estados cuánticos de los fotones en lugar de aplicar la distribución de Boltzmann a los estados cuánticos de los átomos es posible desarrollar la teoría básica del laser, como se ha hecho aquí. Sin embargo, los tratamientos están muy relacionados (como debiera ser, ya que conducen a los mismos resultados) debido a que la densidad de energía $\rho(\nu)$ de (11-34) es proporcional al número n de fotones en un estado de energía $h\nu$ así que esa ecuación es muy similar a las ecuaciones de aumento, (11-10) y (11-11) que fueron utilizadas para derivar la distribución de Bose. Además, (11-35) es idéntica a la condición de equilibrio térmico de (11-4) que también fué utilizada en la derivación de la distribución de Bose.

Hablando en una forma general, el laser es un dispositivo en el cual se prepara un material de tal manera, que el más alto de dos niveles de energía tenga una mayor población que el nivel de energía más bajo, estando el material encapsulado en un resonador apropiado de respuesta bien definida. El sistema produce radiación coherente a aquellas frecuencias que son comunes con el resonador y con la diferencia de energía de los niveles. En la actualidad existe una amplia variedad de laseres (laseres de gas, laseres de líquido, y laseres de estado sólido) que cubren varias regiones del espectro electromagnético. La naturaleza coherente e intensa de la radiación que producen ha propiciado su aplicación en campos tales como radioastronomía, espectroscopía de microondas, fotografía, biofísica y comunicaciones.

11.8 El gas de fotones

En esta sección se empezará el estudio de las aplicaciones de la distribución de Bose. La primera, será una derivación del espectro de radiación de una cavidad (cuerpo negro de Planck) en el cual, los fotones en equilibrio térmico a temperatura T con las paredes de la cavidad, son tratados como un gas que obedece la distribución de Bose. De acuerdo con (11-22), la distribución es

$$n(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\mathscr{E}/kT} - 1}$$

En el análisis que siguió a (11-22) se indicó que el parámetro α se especifica a través del número total de partículas que contiene el sistema gobernado por dicha distribución. Sin embargo, para este caso en particular, el número total de partículas en el sistema no es constante. Un fotón puede ser completamente absorbido al chocar con las paredes de la cavidad, o bien, la pared caliente podrá emitir, a un tiempo, un nuevo fotón. Por lo tanto, para un sistema de fotones, la distribución no podrá contener el término e^{α}. Es decir, la *distribución de Bose para fotones* (o para otros bosones que puedan ser creados o destruidos dentro del sistema) debe tener la forma,

$$n(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\mathscr{E}/kT} - 1} \tag{11-43}$$

De hecho, el valor de α ha sido especificado por el número total de partículas en el sistema; puesto que ese número varía, es necesario que $\alpha = 0$ de modo que $e^{\alpha} = 1$. La confirmación de la validez de este argumento se obtendrá más adelante.

Si $N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ es el número de estados cuánticos en el intervalo de energías entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$, para los fotones en la cavidad, entonces, como $n(\mathscr{E})$ es el número probable de

fotones por estado cuántico, el producto $n(\mathscr{E})\,N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ dará el número de fotones en ese intervalo de energías. Sin embargo, $N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ para la radiación confinada a una cavidad ya se evaluó mediante argumentos geométricos en el ejemplo 1-3, excepto que el lenguaje utilizado en ese caso es diferente del que se emplea aquí; allá se habló de la radiación como ondas, mientras que aquí se habla de ella en términos de partículas (fotones). Allá se encontró que

$$N(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\,\nu^2\,d\nu$$

donde V es el volumen de la cavidad y ν es la frecuencia de una onda contenida en la cavidad. Para este caso, utilizando la relación $\mathscr{E} = h\nu$ para calcular, la energía asociada con un fotón, se encuentra, multiplicando y dividiendo el término $\nu^2\,d\nu$ por h^3, que resulta:

$$N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \frac{8\pi V}{c^3}\,\frac{\mathscr{E}^2\,d\mathscr{E}}{h^3} \tag{11-44}$$

Multiplicando esta expresión por $n(\mathscr{E})$, por la energía de cada fotón, $\mathscr{E}$ y dividiendo entre el volumen V de la cavidad, se obtiene,

$$\rho_T(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \frac{\mathscr{E}\,n(\mathscr{E})N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}}{V} = \frac{8\pi\mathscr{E}^3\,d\mathscr{E}}{c^3h^3(e^{\mathscr{E}/kT} - 1)}$$

donde $\rho_T(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ es la energía por unidad de volumen en el intervalo de energías $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$. El espectro de Planck se obtiene inmediatamente utilizando la relación $\mathscr{E} = h\nu$ para convertir de $\mathscr{E}$ a ν. Por lo tanto,

$$\rho_T(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\,\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}\,h\nu \tag{11-45}$$

La ecuación (11-45) es idéntica a la (1-27) que se obtuvo en el capítulo 1 y que se verificó por comparación con el experimento. Obsérvese que esta concordancia confirma la validez de la distribución de Bose para fotones, (11-43). En la derivación de Planck, la radiación es un conjunto de ondas confinadas a una cavidad. Cada una de estas ondas estacionarias es un modo de vibración que es distinguible de los demás, de la misma forma que los modos de vibración de la red en el modelo de Debye, así que es válido aplicarles la distribución de Boltzmann. En esta derivación, la radiación de la cavidad es un conjunto de partículas indistinguibles, a saber fotones, a los que debe aplicárseles la distribución de Bose.

11.9 El gas de fonones

En la derivación de la distribución de la radiación térmicamente excitada en una cavidad, fue posible utilizar la dualidad onda-partícula de la radiación electromagnética, y se obtuvo tanto desde el punto de vista ondulatorio como corpuscular. Asimismo, la distribución de vibraciones elásticas térmicamente excitadas en un sólido puede reducirse si se aplica la dualidad onda-partícula a la radiación acústica. Así como los fotones son los quanta de la radiación electromagnética, asimismo, los *fonones* son los quanta de la *radiación acústica*. Así como los fotones son emitidos y absorbidos por las vibraciones de los átomos en la pared de una cavidad, así los fonones son emitidos y absorbidos por las vibraciones de los átomos en los puntos de la red de un sólido. Las fuentes de radiación de cada tipo están cuantizadas por lo que la pérdida o ganancia de energía es discreta; la energía discreta que se transfiere a través del sistema tiene un valor $h\nu$, donde ν es la frecuencia de vibración acústica para fonones, y de vibración electro-

nagnética para fotones. De la misma manera como el número de fotones no es fijo ni se :onserva, asimismo el número de fonones no es fijo ni se conserva. La distribución de Bose con $\alpha = 0$, es decir (11-43), se aplica tanto a fonones como a fotones. Desde luego, existen liferencias entre fonones y fotones. Por ejemplo, un fotón se propaga en el vacío, mientras que ın fonón se propaga en una red cristalina. Lo anterior conduce a relaciones impulso-energía liferentes, asunto que se discutirá en el próximo capítulo.

Debe quedar claro que la fórmula de Debye para el calor específico puede deducirse, desde el ɔunto de vista fonónico, de la distribución de Bose, de modo análogo a la deducción de la fórmula de Planck desde el punto de vista fotónico, utilizando la distribución de Bose. En otras palabras, la dualidad onda-partícula de la radiación acústica, se utiliza de la misma forma como antes se utilizó la dualidad onda-partícula de la radiación electromagnética. El cálculo fonónico no será reproducido aquí ya que es completamente análogo al cálculo fotónico y no conduce a resultados nuevos. El sólido contiene un *gas de fonones* del mismo modo como la cavidad contenía un gas de fotones.

11.10 Condensación de Bose y helio líquido

En lo siguiente, se bosquejará una aplicación de la distribución de Bose a un gas ideal, con el fin de comparar los comportamientos cuántico y clásico de un gas. Como aplicación práctica, se considerarán después las sorprendentes propiedades del helio líquido.

La forma general de la distribución de Bose es

$$n(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\mathscr{E}/kT} - 1} \tag{11-46}$$

Para aplicar esto a bosones cuyo número total $\mathscr{N}$ en un sistema permanece constante, como átomos de helio, es necesario determinar primero el parámetro α. Esto se logra igualando,

$$\mathscr{N} = \int_0^{\infty} n(\mathscr{E}) N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}$$

donde $N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}$ es el número de estados cuánticos del sistema en un intervalo de energías entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ y $n(\mathscr{E})$ es el número de bosones por estado cuántico, de modo que la integral es justamente el número total. Utilizando (11-46) se tiene:

$$\mathscr{N} = \int_0^{\infty} \frac{N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}}{e^{\alpha} e^{\mathscr{E}/kT} - 1} \tag{11-47}$$

Para seguir adelante, es necesario determinar $N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}$, el número de estados en el intervalo de energías $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$, para un gas ideal. Considérese las partículas del gas, contenidas en una caja cúbica de lado a. La energía potencial para una partícula en una caja tridimensional de ese tipo, es la correspondiente a un pozo cuadrado de potencial tridimensional y de paredes infinitas. La ecuación de Schrodinger para un pozo cuadrado unidimensional de paredes infinitas, se resolvió en la sección 6-8, habiéndose obtenido para las energías permitidas $\mathscr{E}_n = (h^2/8ma^2)n^2$. Haciendo una extensión simple del cálculo anterior al caso de tres dimensiones, se encuentra que las energías permitidas estarán dadas por:

$$\mathscr{E} = \frac{h^2}{8ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{11-48}$$

en donde los números cuánticos n_x, n_y, n_z son enteros positivos. El número de estados en un intervalo de energía puede obtenerse graficando, en un espacio formado por los ejes n_x, n_y, n_z, los estados permitidos (que serán puntos donde n_x, n_y, n_z tomarán valores enteros positivos) y contándolos. Esto ya se hizo, aunque en un contexto diferente, para el cálculo del ejemplo 1-3. En ese caso se definió $r = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$, y en 1-15 se encontró que el número de estados correspondientes a una r entre r y $r + dr$ es:

$$N(r)\,dr = \frac{\pi r^2\,dr}{2}$$

Lo mismo es válido en este caso. Lo anterior puede convertirse a la forma deseada $N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$, utilizando (11-48) para escribir

$$\mathscr{E} = \frac{h^2}{8ma^2}\,r^2$$

y después tomando esta ecuación y su diferencial, para calcular

$$\frac{\pi r^2\,dr}{2} = \frac{\pi}{4}\left(\frac{h^2}{8ma^2}\right)^{-3/2}\mathscr{E}^{1/2}\,d\mathscr{E} = \frac{4\pi a^3}{h^3}\,(2m^3)^{1/2}\mathscr{E}^{1/2}\,d\mathscr{E}$$

De este modo, el número de estados cuando $\mathscr{E}$ se encuentre entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ es

$$N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \frac{4\pi V}{h^3}\,(2m^3)^{1/2}\mathscr{E}^{1/2}\,d\mathscr{E} \tag{11-49}$$

donde $V = a^3$, es el volumen de la caja.

Si ahora se combina este resultado con (11-47) y se realiza la integración se obtiene:

$$\mathscr{N} = \frac{(2\pi mkT)^{3/2}V}{h^3}\,e^{-\alpha}\left(1 + \frac{1}{2^{3/2}}\,e^{-\alpha} + \frac{1}{3^{3/2}}\,e^{-2\alpha} + \cdots\right)$$

Para simplificar la forma de esta ecuación, sea $e^{-\alpha} = A$ de modo que

$$\mathscr{N} = \frac{(2\pi mkT)^{3/2}V}{h^3}\,A\left(1 + \frac{1}{2^{3/2}}\,A + \frac{1}{3^{3/2}}\,A^2 + \cdots\right) \tag{11-50}$$

Cuando la masa m es grande y la temperatura T es alta, A debe ser pequeña puesto que $\mathscr{N}$ está fija. Bajo estas circunstancias, los términos que aparecen con potencias mayores que uno se pueden descartar. Sin embargo, m grande y alta T debería corresponder a la región clásica. De hecho, se encuentra que el primer término proporciona el resultado clásico de Boltzmann,

$$\mathscr{N} = \frac{(2\pi mkT)^{3/2}V}{h^3}\,A$$

o bien,

$$A = \frac{\mathscr{N}h^3}{(2\pi mkT)^{3/2}V} = e^{-\alpha} \tag{11-51}$$

Obsérvese que $A = e^{-\alpha}$ es proporcional a $\mathscr{N}$, como en el resultado de Boltzmann para un sistema de osciladores clásicos, como se dijo después de (11-23). Obsérvese también que aquí se concluye que como $\mathscr{N}$ es fija, α deberá ser muy grande (ya que A es muy pequeña), en

contraste con la anterior conclusión de que α es cero para un sistema de bosones en donde $\mathcal{N}$ varía.

Si ahora se calcula la energía total E para un gas ideal, a partir de

$$E = \int_0^\infty \mathscr{E} n(\mathscr{E}) N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}$$

se obtiene

$$E = \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} V\left(\frac{3}{2}kT\right) A\left(1 + \frac{1}{2^{5/2}} A + \frac{1}{3^{5/2}} A^2 + \cdots\right) \tag{11-52}$$

Una vez más, se obtiene el resultado clásico para valores pequeños de A. Si se desprecian términos de potencias mayores que uno en A y utilizando (11-51), se obtiene $E = (3/2)\mathcal{N}kT$. Esto corresponde a una energía promedio por partícula $E/\mathcal{N}$ igual a $(3/2)kT$, que corresponde al resultado clásico de equipartición de la energía para un movimiento traslacional tridimensional. El resultado general de Bose para la energía promedio por partícula, que se obtiene dividiendo (11-52) entre (11-50), incluyendo términos hasta A^2 es,

$$\bar{E} = \frac{E}{\mathcal{N}} = \frac{3}{2}kT\left[1 - \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\mathcal{N}h^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}}\right] \tag{11-53}$$

El término mayor que 1 en la expresión entre paréntesis cuadrados de (11-53), representa la desviación del gas de Bose, de la ley clásica, que algunas veces se llama *efecto de degeneración*. (El efecto de degeneración, o degeneración del gas, no está relacionado con la degeneración que describe estados cuánticos diferentes que tienen la misma energía). La ecuación (11-53) que desprecia términos de orden mayor, corresponde al caso de degeneración débil. Obsérvese que el término de degeneración es *negativo*, de modo que la energía promedio por partícula es menor para un gas de Bose que para un gas clásico. Esto corresponde a un resultado anterior en donde se encontró una mayor probabilidad de tener dos partículas en un estado de energía para la distribución de Bose que para la distribución de Boltzmann, consecuentemente los estados de energía más bajos en el gas de Bose están relativamente más llenos que en un gas clásico. Esto se manifiesta físicamente, por ejemplo, como una presión del gas más baja (impulso promedio menor) del gas de Bose que un gas clásico a la misma temperatura.

Ejemplo 11-4. Cuando la distancia entre partículas es comparable o menor que la longitud de de Broglie asociada a las partículas en base a su temperatura, debería esperarse la observación de efectos ondulatorios, es decir, efectos cuánticos en el sistema de partículas. Demostrar que este criterio conduce al requisito de que el término de degeneración $\mathcal{N}h^3/V(2\pi mkT)^{3/2}$ no sea despreciable comparado con 1 si se esperan detectar desviaciones del comportamiento clásico.

La longitud de onda de de Broglie de una partícula es $\lambda = h/p$. En un gas en equilibrio a temperatura T, la energía cinética promedio es $(3/2)kT$ de modo que $p = \sqrt{2mK} = \sqrt{3mkT}$. Por lo tanto,

$$\lambda = \frac{h}{(3mkT)^{1/2}}$$

Si el volumen de gas es V y existen $\mathcal{N}$ átomos del gas, el volumen por partícula $V/\mathcal{N}$ puede igualarse a d^3, donde d es la separación interatómica promedio. Por lo tanto,

$$d = \left(\frac{V}{\mathcal{N}}\right)^{1/3}$$

Ahora bien, si $\lambda \geq d$ se espera que los efectos ondulatorios sean importantes. Esto requiere que

$$\frac{h}{(3mkT)^{1/2}} \geq \left(\frac{V}{\mathcal{N}}\right)^{1/3}$$

o bien, elevando al cubo en cada lado,

$$\frac{h^3}{(3mkT)^{3/2}} \geq \frac{V}{\mathcal{N}}$$

lo que es lo mismo que

$$\frac{\mathcal{N}h^3}{V(3mkT)^{3/2}} \geq 1$$

Por lo tanto, $\mathcal{N}h^3/V(2\pi mkT)^{3/2}$ deberá excederse aproximadamente 1/3, y en consecuencia, el término después del 1 en la parte entre paréntesis cuadrados de (11-53) deberá excederse aproximadamente 1/6 para cumplir con el criterio impuesto. ◀

¿Bajo qué circunstancia podría detectarse experimentalmente el efecto de degeneración? El término de degeneración es despreciable prácticamente, para la mayoría de los gases, ya que tiene un valor de aproximadamente 10^{-5}, de modo que la distribución de Boltzmann se aplica casi universalmente. Obsérvese que el término de degeneración, $\mathcal{N}h^3/V(2\pi mkT)^{3/2}$, será más importante cuanto menor sean la masa m y la temperatura T, y mayor sea la densidad $\mathcal{N}/V$. Los gases de masa más pequeña que están sujetos a la distribución de Bose (impulso angular de spin entero o cero) son H_2 y H_e. Si esos gases se preparan de modo que tengan alta densidad y baja temperatura, quedarán muy cerca de su punto de condensación. Por esta razón, y otra que se mencionará en breve, el efecto de degeneración también se le llama *condensación de Bose.* Para el H_2 el término de degeneración en su punto normal de condensación es menor que 1/100, mientras que para He cerca de su punto normal de condensación (4.2 °K), el término de degeneración es 1/7. Por lo tanto, deberá ser más fácil obtener efectos observables para el helio. En este caso, la teoría será aproximada, ya que a tan altas densidades, el comportamiento es más parecido al de un gas real de partículas en interacción, que al de un gas ideal de partículas sin interacción. En efecto, en la fase líquida, o en la fase condensada, se observan los efectos no clásicos más impresionantes en el comportamiento del helio. A continuación se describen estos efectos.

El gas de helio ordinario se compone casi en su totalidad de átomos neutros del isótopo He^4. El impulso angular de spin de un átomo tal es cero, de modo que debe utilizarse la distribución de Bose para describir el comportamiento de dicho gas. A la presión atmosférica normal, el helio gas se condensa a líquido a 4.18 °K. Permanece como líquido, es decir, no se congela para formar un sólido, aún hasta el cero absoluto de temperatura, si se enfría a una presión igual a su presión de vapor. (Para obtener helio sólido, es necesario presurizar el líquido y se necesitan aproximadamente 26 atm de presión, muy cerca del cero absoluto). Si se reduce la temperatura del helio líquido a 2.18°K, bombeando el vapor se observa un cambio dramático en sus propiedades. La temperatura de 2.18 °K es llamada *punto* λ ya que la gráfica del calor específico en función temperatura tiene una forma que se parece a la letra λ con la anomalía en 2.18 °K. El helio líquido por encima de esta temperatura se llama HeI y HeII por abajo de esta temperatura. El HeI es esencialmente un fluído clásico, su comportamiento es el usual, pero el HeII contiene una componente de *superfluído* que ocasiona una serie de efectos cuánticos a gran escala muy espectaculares, incluyendo los siguientes:

1. A medida que se disminuye la temperatura del helio líquido por evaporación y el vapor es bombeado fuera, el líquido hierve en forma usual. Sin embargo, cuando se alcanza y después se supera el punto λ la ebullición se suspende súbitamente en todo el líquido y la temperatura y presión de vapor bajan y el líquido se muestra completamente en calma (ver la figura 11-8). Esto

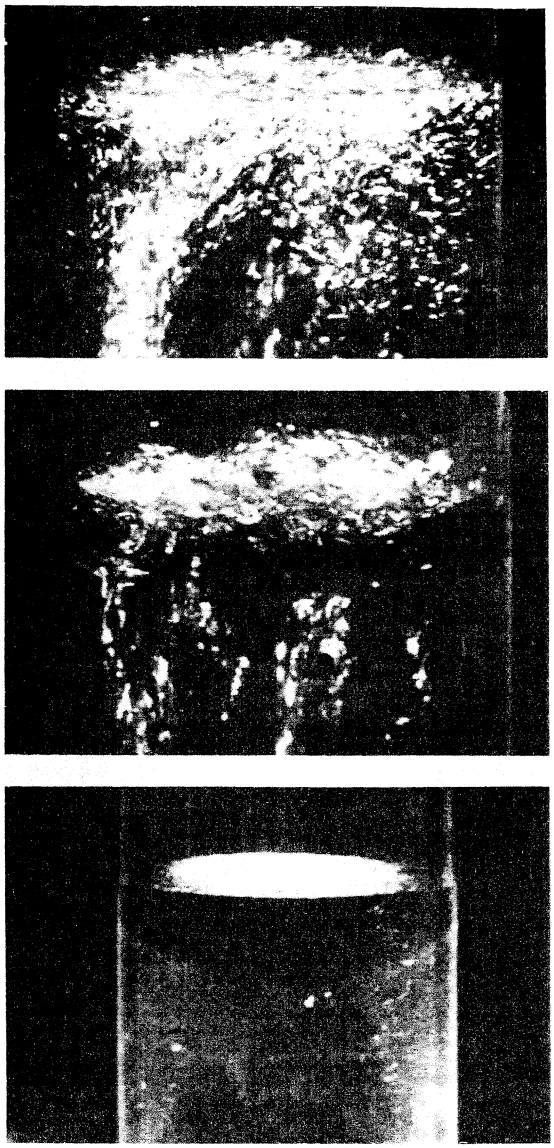


FIGURA 11-8
Transición del punto λ en el helio líquido. Cuando el helio líquido es enfriado a partir de su punto de ebullición normal a 4.2°K por evaporación, utilizando bombas de vacío, normalmente hierve formando pequeñas burbujas. Al llevar a cabo la transición de fase de HeI a HeII en el punto λ , 2.18 °K, de pronto hierve violentamente (ver fotos *superior* y del *medio*) e igualmente de pronto deja de hervir (ver la foto *inferior*). Por debajo del punto de transición, el helio líquido no puede hervir, aún cuando se bombea, y la evaporación y el enfriamiento continúan. (Cortesía de A. Leitner, Instituto Politécnico Rensselaer).

se explica por el hecho de que se puede conducir calor fuera del líquido con prácticamente resistencia nula, ya que se ha medido que la conductividad térmica aumenta por un factor de aproximadamente un millón por debajo del punto λ.

2. Se puede determinar la viscosidad del helio líquido, midiendo su velocidad de flujo a través de un tubo capilar fino. En el punto λ el valor medido de la viscosidad disminuye por un factor de aproximadamente un millón.

3. Lo más extraño y espectacular es que, por debajo del punto λ el helio líquido en forma de película delgada es capaz de treparse por las paredes del recipiente que lo contiene, como se

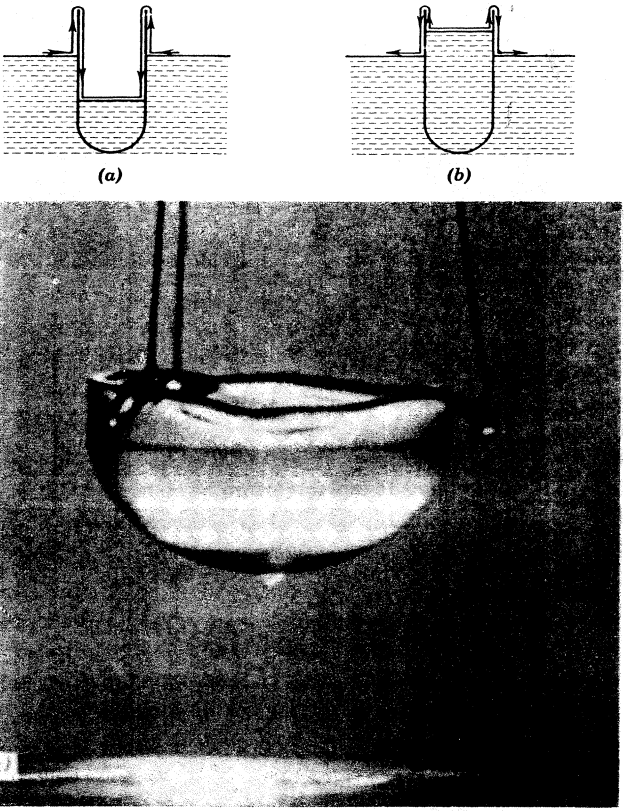


FIGURA 11-9
Demostración de la superfluidez del HeII por el movimiento de trepamiento de una película de He^4 líquido por debajo del punto de transición. El comportamiento de la película, sugestivo del flujo de un líquido por un sifón, se muestra esquemáticamente para cuando los niveles del recipiente están (a) por debajo y (b) por encima del nivel del recipiente de He líquido. En (c) se presenta una fotografía de un vaso de vidrio parcialmente lleno con HeII líquido, suspendido por hilos por encima de la superficie del mismo líquido, que se ve en la parte inferior de la fotografía. El HeII se trepa por la pared interna, por arriba del filo del vaso y se desliza hacia abajo, en forma de película delgada, por la pared externa hasta formar una gota en el fondo. Cuando esta gota cae otra se forma y así sucesivamente hasta que el vaso se vacía. (Cortesía de A. Leitner, Instituto Politécnico Rensselaer)

muestra en la figura 11-9. La velocidad de este movimiento ordenado de masa, puede ser 30 cm por segundo o más. El efecto implica primero que el helio se absorbe en la superficie total del recipiente frío, para formar una película delgada. Después, la película actúa como un sifón, a través del cual la película fluye con viscosidad casi nula.

K. Mendelssohn escribió acerca del flujo de la película, lo siguiente:

"Si el vaso se retira del baño, el nivel bajará hasta alcanzar el nivel del baño. Si el vaso se saca completamente, el nivel continuará bajando, y uno puede ver cómo se forman pequeñas gotas de helio en el fondo del vaso y que regresan al baño. Este es el tipo de cosas que hacen que uno mire dos veces, se talle los ojos y se pregunte si es realmente verdad. Recuerdo muy bien la noche cuando observamos por primera vez esta transferencia de la película. Fue bastante después de la cena y buscamos en el edificio hasta que encontramos a dos físicos nucleares aún trabajando. Cuando ellos también vieron las gotas, nos sentimos más felices".

Todas las propiedades del helio II indican que tiene un alto grado de orden. Por ejemplo, la casi total ausencia de viscosidad quiere decir que, cuando el HeII fluye, no ocasiona turbulencias a pequeña escala que causan pérdidas de energía por fricción que son las causantes de la viscosidad de los líquidos ordinarios. Este orden lo impone el factor de aumento $(1 + n)$ que frecuentemente se encuentra al estudiar el comportamiento a bajas energías de un sistema de bosones. Cuando la temperatura es suficientemente baja para permitirlo, todos los átomos de helio en un sistema tienden a condensarse en el mismo estado cuántico de más baja energía. La componente de superfluidez, cuya concentración rápidamente se acerca al 100% al disminuir la temperatura por debajo del punto λ se forma con aquellos átomos que se encuentran en ese estado cuántico. En la medida en que todos los átomos pueden llegar a ese mismo estado microscópico, se convierte en el estado del sistema macroscópico total, que sólo puede comportarse en forma ordenada, de modo que la acción de un átomo está correlacionada con la acción de los demás. La tendencia es extremadamente pronunciada ya que el factor $(1 + n)$ tiene un valor extremadamente grande si n es algo parecido al número total de átomos en el vaso con helio líquido.

11.11 El gas de electrones libres

En esta y en la sección que sigue se aplicará la distribución de Fermi a sistemas cuánticos.

De un modo análogo al seguido para el gas de bosones, se podría deducir el comportamiento de un gas ideal de fermiones. En el mismo grado de aproximación se podría encontrar, por ejemplo, que la energía promedio por partícula es:

$$\bar{E} = \frac{E}{\mathcal{N}} = \frac{3}{2}kT\left[1 + \frac{1}{2^{5/2}}\frac{\mathcal{N}h^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}}\right] \tag{11-54}$$

que es el resultado de Fermi correspondiente al resultado de Bose (11-53). El término de degeneración (segundo término entre paréntesis cuadrado) es *positivo*, de modo que la energía promedio por partícula es mayor en el gas de Fermi que en el gas clásico. Esto conduce a una posibilidad menor (estrictamente cero) de encontrar a dos partículas en el mismo estado cuántico para la distribución de Fermi que para la distribución de Boltzmann, así que en el gas clásico, los estados de menor energía estarán relativamente más llenos que en el gas de Fermi. Físicamente esto se manifiesta como una mayor presión del gas (impulso promedio mayor) a la misma temperatura, para un *gas de Fermi* respecto de un gas clásico. Obsérvese una vez más como los resultados de Bose y Fermi quedan en lados opuestos del resultado clásico.

Es natural preguntarse por un ejemplo de un gas de Fermi cuyo efecto de degeneración sea detectable. En el capítulo 15 se encontrará un ejemplo en los protones y neutrones confinados a un núcleo. El helio gas, que sólo contenga el isótopo He^3 también esta sujeto a la distribución de Fermi, lo hacen todas las partículas con impulso angular de spin semientero, y permanece

como gas, sin condensarse hasta una temperatura lo suficientemente baja para que el término de degeneración de (11-54) sea detectable. Este isótopo es muy raro y difícil de obtener en cantidades grandes, sin embargo, se ha observado que el comportamiento de los átomos de He^3 es notablemente diferente que el de los átomos de He^4 de acuerdo con las predicciones de las diferentes funciones de distribución que se les aplican. Por ejemplo, la presión de vapor del He^3 líquido, a una temperatura dada, es mucho mayor que la del He^4 líquido. En efecto, esto constituye la base de un método práctico para enfriar a 0.02°K.

Sin embargo, sería sumamente fácil detectar los efectos del término de degeneración para fermiones, si se pudiera obtener un *gas de electrones*. El término de degeneración se puede escribir como $nh^3/(2\pi mkT)^{3/2}$, en donde $n = \mathcal{N}/V$ es la densidad de las partículas. Obsérvese que una masa m pequeña y una alta densidad n pueden aumentar la importancia de este término, así como también una baja temperatura T. Dado que la masa electrónica es varios miles de veces más pequeña que la de los átomos, el efecto de degeneración para electrones debería ser detectable aún a altas temperaturas. Para los electrones de un metal, la densidad n de electrones de conducción es también muy alta, de modo que los electrones de conducción en un metal manifiestan efectos de degeneración cuántica. La pregunta que prevalece es si es posible considerar dichos electrones, aún aproximadamente, como un gas de electrones libres, es decir, un gas ideal.

En un sólido cristalino, la mayor parte de los electrones atómicos están ligados a los núcleos en los sitios de la red, pero si se trata de un conductor metálico, los electrones de las subcapas exteriores de los átomos se encuentran relativamente libres, de modo que estos electrones, se pueden mover por todo el sólido. Estos son los *electrones de conducción*. Debido a que su repulsión mutua se cancela, en promedio, por la atracción de los núcleos atómicos, los electrones de conducción se pueden considerar, aproximadamente, como partículas libres, y pueden ser tratados, hasta una buena aproximación, como un gas ideal de electrones (ver la figura 6-24). En efecto, el interior de un sólido puede ser considerado como una región de potencial aproximadamente constante para estos electrones, de modo que las fronteras del metal actúan como paredes de potencial alto. Entonces, el electrón se comporta como una película en una caja cuyos estados cuánticos ya se conocen (ver la sección 6-8).

Para obtener el número de estados $N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ en el intervalo de energías entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ simplemente se cuenta el número de ondas estacionarias que representan un estado de movimiento definido en ese intervalo de energía. Este cálculo ya se hizo anteriormente, para un gas ideal de una caja, con los resultados descritos en (11-49). Los resultados aquí son los mismos, después de tomar en cuenta las dos posibles orientaciones del spin para un electrón con una eigenfunción dada.

Es decir:

$$N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3}\,\mathscr{E}^{1/2}\,d\mathscr{E} \tag{11-55}$$

Multiplicando por el número probable de electrones por estado cuántico $n(\mathscr{E})$, se obtiene,

$$n(\mathscr{E})N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3}\,\frac{\mathscr{E}^{1/2}\,d\mathscr{E}}{e^{(\mathscr{E}-\mathscr{E}_F)/kT}+1} \qquad \mathscr{E}_F = -\alpha kT \tag{11-56}$$

Esta es la *distribución de energías del gas de electrones para los electrones de conducción en un metal.*

Si enseguida se supone que la temperatura es muy baja (estrictamente hablando, $T = 0$), se sabe que todos los estados cuánticos, hasta la energía de Fermi, $\mathscr{E}_F$ están ocupados, y que ninguno de los estados más altos está ocupado. En ese caso, el número total de electrones libres es igual al número total de estados distintos, hasta la energía $\mathscr{E}_F$, y se tiene entonces una forma de calcular la energía de Fermi.

Es decir,

$$\mathcal{N} = \int_0^{\mathscr{E}_F} N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E} = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} \int_0^{\mathscr{E}_F} \mathscr{E}^{1/2}\, d\mathscr{E} = \frac{16\pi V(2m^3)^{1/2}}{3h^3}\, \mathscr{E}_F^{3/2}$$

O bien

$$\mathscr{E}_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3\mathcal{N}}{\pi V}\right)^{2/3} \tag{11-57}$$

Para temperaturas tales que $kT \ll \mathscr{E}_F$ este resultado es una aproximación excelente. Para metales ordinarios, se requieren temperaturas del orden de varios miles de grados, antes de que la aproximación deje de ser válida.

Ejemplo 11-5. Considérese plata en el estado metálico, con un electrón libre (de conducción) por átomo.

(a) Calcular la energía de Fermi de (11-57).

La densidad de la plata es 10.5 g/cm^3 y su peso atómico es 108. Entonces,

$$n = \frac{\mathcal{N}}{V} = \frac{6.02 \times 10^{23}\ \text{atom/mol} \times 10.5\ \text{g/cm}^3}{108\ \text{g/mol}} \times 1\ \text{electrón libre/átomo}$$

$$= 5.9 \times 10^{22}\ \text{electrón libre/cm}^3 = 5.9 \times 10^{28}/\text{m}^3$$

Por lo tanto,

$$\mathscr{E}_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{2/3} = \frac{(6.6 \times 10^{-34}\ \text{joule-seg})^2}{8 \times 9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg}} \times \left(\frac{3 \times 5.9 \times 10^{-28}/\text{m}^3}{\pi}\right)^{2/3}$$

$$= 8.8 \times 10^{-19}\ \text{joule} = 5.5\ \text{eV}$$

(b) Calcular el término de degeneración para los electrones de conducción en la plata metálica a 300°K. Se obtiene,

$$\frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} = \frac{5.9 \times 10^{28}/\text{m}^3 \times (6.6 \times 10^{-34}\ \text{joule-seg})^3}{(2\pi \times 9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg} \times 1.38 \times 10^{-23}\ \text{joule/°K} \times 300\text{°K})^{3/2}}$$

$$\simeq 4700$$

de modo que el segundo término en los paréntesis cuadrados de (11-54) tiene el valor

$$\frac{1}{2^{5/2}} \frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} \simeq 820$$

Por lo tanto, el término de degeneración es extremadamente grande y domina totalmente el primer término (clásico) de (11-54). Entonces, se dice que el gas de electrones es un gas de Fermi completamente degenerado, es decir, se comporta como si $T \simeq 0$°K con electrones en la configuración de menor energía. Un gas como ese muestra un comportamiento cuántico (es decir, no clásico) hasta la temperatura más alta que se puede obtener en un metal; el gas de electrones en plata, se mantiene completamente degenerado hasta temperaturas del orden de 105°K. A esas temperaturas y mayores, el término de degeneración se vuelve pequeño en comparación con uno. ◀

Ahora es posible explicar un resultado que la física clásica era incapaz de explicar, a saber, la observación experimental de que los electrones de conducción no contribuyen al calor específico de los metales a temperaturas ordinarias. De acuerdo con el punto de vista clásico, los

electrones toman parte del movimiento térmico en un metal, cada electrón libre con una energía promedio de $(3/2)kT$. Por lo tanto, el calor específico de un metal no debiera ser simplemente $3R$, debido a las vibraciones de los *átomos* en los sitios de la red, sino que debiera ser $(3 + 3/2)R$, donde el término $(3/2)R$, es la contribución del *gas de electrones* por mol. El origen del término puede verse haciendo notar que $E = (3/2)kTN_0 = (3/2)RT$, entonces $c_v = \mathrm{dE/dT} = 3/2\mathrm{R}$ donde N_0 es el número de Avogadro. De acuerdo con el modelo de Fermi de un gas de electrones, éstos no presentan este comportamiento clásico, sino hasta que la temperatura alcanza aproximadamente 105 °K. Es decir, no hay equipartición de la energía entre las contribuciones de la red y de los electrones, de modo que en este sentido, los electrones no están ni siquiera cerca del equilibrio térmico con los átomos del metal que los confinan. Al aumentarse la temperatura, la distribución de Fermi de electrones entre los niveles de energía disponible se afecta muy poco, en el extremo de altas energías (ver fig. 11-3), de modo que la energía promedio del electrón prácticamente no cambia. Esto quiere decir que a las temperaturas ordinarias, el gas de electrones no contribuye, en forma apreciable, al calor específico del metal. Es decir, $E \neq (3/2)kTN_0$, sino que es aproximadamente independiente de la temperatura, de modo que $c_v = 0$. Entonces, la distribución de Fermi concuerda con los hechos experimentales que implican electrones a temperaturas ordinarias.

A temperaturas ordinarias, y aún a temperaturas suficientemente altas para que la ley de Dulong y Petit, $c_v = 3R$ sea una buena aproximación de la contribución de las vibraciones de la red al calor específico del sólido, el calor específico electrónico, es demasiado pequeño, comparado con el término relacionado con el calor específico atómico, para que sea detectable. A temperaturas cercanas al cero absoluto, donde el calor específico atómico es muy pequeño, la contribución electrónica excederá la contribución atómica. Es en esta región de unos cuantos grados Kelvin, donde se observa experimentalmente la dependencia con el calor específico electrónico, una vez más en concordancia con las predicciones de la distribución de Fermi.

11.12 Potencial de contacto y emisión termiónica

Hasta ahora se ha considerado al electrón en un metal como una partícula en una caja, es decir, implícitamente se ha supuesto que los electrones no se escapan del metal, de modo que la caja de potencial tiene paredes muy altas, sin embargo, se sabe que los electrones se pueden escapar de los metales, como en el efecto fotoeléctrico, la emisión termiónica, etc., por lo que de cierto modo, se debe modificar la función potencial. Dentro del metal la función potencial es aproximadamente constante y cerca del límite del metal, aumenta rápidamente para alcanzar otro valor constante más alto, fuera del metal. Si se toma el cero de la energía potencial de modo que corresponda a un electrón que está fuera y lejos del metal, entonces $-V_0$ podrá representar la profundidad del pozo de la energía potencial resultante como se ilustra en la figura 11-10.

A partir de experimentos de efecto fotoeléctrico, se puede determinar V_0 específicamente del hecho de que existe una frecuencia de corte V_0 por debajo de la cual los fotones no pueden emitir electrones del metal (véase la sección 2-2). Lo anterior sugiere que los electrones de mayor energía del metal se encuentran en un intervalo de energías hv_0 por debajo de la parte superior del pozo. El hecho de que la fotocorriente aumenta rápidamente a medida que la energía del fotón aumenta por encima del valor del umbral, sugiere un aumento abrupto, del número de electrones con una energía cinética decreciente dentro del metal. Esto corresponde con las características de la distribución de Fermi, donde los electrones más energéticos tienen la energía cinética $\mathscr{E}_F$ y muchos otros electrones en la vecindad tienen energías cinéticas menores. Por lo tanto, se puede mantener la distribución de estados cuánticos respecto a la energía, que se encontró para el caso de una partícula en una caja. (Véase en la sección 6-8 un análisis acerca de la similitud de los niveles de energía entre una caja de potencial de paredes infinitas y una de paredes finitas). A T = 0, todos los estados estarán llenos hasta una

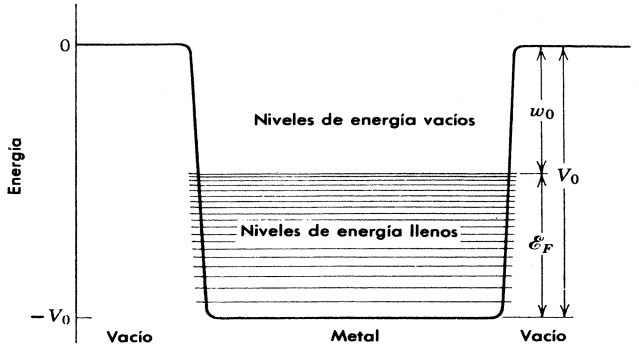


FIGURA 11-10
Energía potencial promedio para un electrón de conducción en un metal. El potencial es un pozo de profundidad V_0 cuya pared se levanta rápidamente cerca de la frontera del metal hasta cero. Los niveles de energía aumentan en densidad, proporcionalmente a $\mathscr{E}^{1/2}$, y se van llenando hasta la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$. La función trabajo es w_0, y $V_0 = w_0 + \mathscr{E}_F$.

energía $\mathscr{E}_F$ por encima del fondo del pozo, de modo que este estado más alto tendrá una energía total $-h\nu_0$. Es decir, $-V_0 + \mathscr{E}_F = -h\nu_0$. Ahora bien, recuérdese que $h\nu_0 = w_0$, la función trabajo del metal, de modo que $-V_0 + \mathscr{E}_F = -w_0$ o bien

$$V_0 = \mathscr{E}_F + w_0 \tag{11-58}$$

Para plata, la función trabajo es 4.7 eV y $\mathscr{E}_F$ es 5.5 eV, de modo que V_0 es de 10.2 eV. Para la mayoría de los metales, V_0 se encuentra entre 5 y 15 eV, como se puede ver de la tabla 11-2. Desde luego que, a temperaturas ordinarias, la distribución de Fermi no presenta un corte brusco en $\mathscr{E}_F$ sino que se ensancha de modo continuo en un intervalo angosto de energías cercanas a $\mathscr{E}_F$. En una región del orden de kT a ambos lados de la energía de Fermi, es decir, una región de transición del orden de 2kT, el número de partículas por estado cuántico cambia de un valor cercano a uno a un valor cercano a cero. En el límite cuando $T \to 0$ esta región de transición se vuelve infinitamente angosta.

Con este modelo para el comportamiento de los electrones en un metal, se puede explicar *la diferencia en potencial de contacto* de dos metales y entender el proceso de *emisión termiónica*.

TABLA 11-2. Función de trabajo y energía del nivel de Fermi para algunos metales.

Metal	w_0 (eV)	$\mathscr{E}_F$ (eV)
Ag	4.7	5.5
Au	4.8	5.5
Ca	3.2	4.7
Cu	4.1	7.1
K	2.1	2.1
Li	2.3	4.7
Na	2.3	3.1

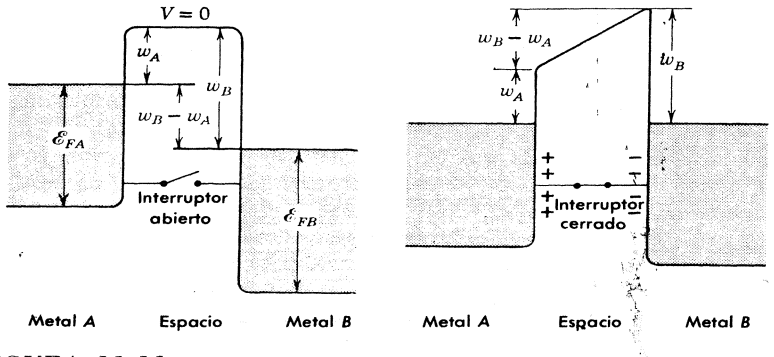


FIGURA 11-11

Izquierda: Se muestra la energía potencial para un electrón en dos metales separados A y B con diferentes funciones de trabajo. *Derecha:* Ahora, los metales se encuentran conectados por un alambre, de modo que adquieren carga opuesta y presentan una diferencia de potencial de contacto.

Primero se considerará el proceso de emisión termiónica que es de gran importancia práctica ya que es responsable de la emisión de electrones por un filamento caliente en un bulbo. A temperaturas altas, (es decir, valores grandes de kT) la distribución de electrones entre los estados de energía disponibles, se extiende bien por encima de $\mathscr{E}_F$. A temperaturas suficientemente altas, algunos electrones adquirirán energías cinéticas mayores que V_0 (es decir, mayores que $\mathscr{E}_F + w_0$) y, por lo tanto, escaparán del metal. Se puede calcular la densidad de corriente termoeléctrica emitida por una superficie metálica, como función de la temperatura, a partir de la distribución de Fermi y a partir de la distribución de Boltzmann. El cálculo implica determinar cuantos electrones llegarán a la superficie del metal moviéndose en la dirección deseada y con la energía cinética suficiente para escapar. Las dos distribuciones proporcionan diferentes dependencias con la temperatura para la densidad de corriente, y los resultados experimentales se inclinan en favor de la distribución de Fermi para electrones.

Respecto a la diferencia en potencial de contacto de dos metales, considérese dos metales A y B que inicialmente no están en contacto, como se indica esquemáticamente en el primer miembro de la figura 11-11. Fuera del metal, la energía potencial de un electrón es cero. Dentro de los metales, el nivel de Fermi del metal A se encuentra a w_A por debajo del cero y el nivel de Fermi del metal B se encuentra a w_B debajo del cero. Sea $w_B > w_A$ de modo que el nivel de Fermi del metal A es más alto que el de B. Enseguida, considérese que los metales están conectados eléctricamente, como se ilustra en el segundo miembro de la figura 11-11. Aquellos electrones de mayor energía del metal A fluirán hacia el metal B, llenando los niveles de energía en B hasta justamente por encima de la energía de Fermi, dejando vacíos los niveles superiores de A. El proceso continúa hasta alcanzar el equilibrio; es decir, hasta que los niveles de energía más altos de A y B se encuentren a la misma energía, ya que cuando se llega a esta situación, se minimiza la energía total del sistema. El resultado es que en este proceso, el metal A se carga positivamente y el metal B se carga negativamente. En consecuencia, al conectarse eléctricamente se establece una diferencia de potencial entre los metales $(w_B - w_A)/e$ resultado que esencialmente concuerda con los valores experimentales.

11.13 Descripciones clásica y cuántica del estado de un sistema

En la sección 4-9 se vió un ejemplo de como el estado instantáneo de movimiento de una partícula clásica, puede ser representado por un punto en el espacio fase. Para el movimiento en una dimensión que se

consideró, el espacio fase era un espacio bidimensional cuya abscisa era la posición x y cuya ordenada era el impulso p_x. Para un movimiento en tres dimensiones, el espacio fase es un espacio de seis dimensiones de coordenadas x, y, z, p_x, p_y, p_z. A medida que la partícula se mueve, el punto que la representa en el espacio fase traza una trayectoria en el mismo y en el caso del ejemplo anterior, de un oscilador armónico simple, dicha trayectoria es una elipse. Si se tuviera un gran número de dichos osciladores se tendría un gran número de puntos representativos en el espacio fase que corresponderían a la distribución instantánea de los osciladores. Para la mayoría de los sistemas de interés, se puede escribir la energía de cada miembro como $E = K + V = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m + V(x, y, z)$ de modo que la localización de un punto (x,y,z,p_x,p_y,p_z) en el espacio fase proporciona la energía total de ese miembro del sistema representado por el punto. La distribución de puntos dará la distribución en energía de todos los miembros del sistema.

Por lo tanto, en mecánica estadística clásica, se puede caracterizar la distribución en energía de un sistema, por el número de puntos en cada fracción de volumen del espacio fase $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$. A cada uno de dichos elementos de volumen se le llama *una celda* en el espacio fase y los puntos en la celda tienen una energía total entre E y $E + dE$, que corresponde a los valores del impulso entre p_x y $p_x + \Delta p_x$, etc. y valores de la posición entre x y $x + \Delta x$, etc. La celda se escoge de modo tal que sea lo suficientemente pequeña para que la energía total promedio de sus puntos representativos difiera poco de la energía de cualquiera de ellos; se escoge lo suficientemente grande para que haya muchos puntos en la celda y que, por lo tanto, se puedan aplicar las ideas estadísticas. De esta manera, el tamaño de la celda es un tanto arbitrario e indefinido, pero una vez escogida, la celda se caracteriza por su energía total promedio y su número de población. La celda, entonces, es el análogo estadístico del estado cuántico, en la estadística cuántica. En la figura 11-12 se ilustra la situación para un sistema unidimensional.

En mecánica cuántica, este modelo se debe modificar debido al principio de incertidumbre. Por un lado no se puede describir la trayectoria de un punto representativo en el espacio fase bidimensional ya que no se pueden saber, simultáneamente, los valores exactos x y p_x para la partícula. Lo mejor que se puede hacer es localizar el punto representativo, a todo tiempo, entre x y $x + \Delta x$ p_x y $p_x + \Delta p_x$ donde $\Delta x \Delta p_x \simeq h$, así que en lugar de tener un punto que traza una línea, se tiene una pequeña área que traza una trayectoria ancha en forma de listón en el espacio fase bidimensional. Sin embargo, lo más importante es el hecho de que existe un tamaño mínimo definido para una celda en la descripción cuántica, ya que una celda que tuviera $\Delta x \Delta p_x$ menor que h, no tiene significado puesto que dicha especificación sería más precisa que lo que permite el principio de incertidumbre. Por lo tanto, para el espacio fase general de 6 dimensiones, la celda más pequeña tendrá un "volumen" de h^3.

Por lo tanto, en la descripción cuántica es posible eliminar la arbitrariedad e indefinición del elemento de volumen en el espacio fase. Dado que el tamaño de la celda afecta obviamente el conteo de divisiones distinguibles de la energía total del sistema, existe una indeterminación en los resultados de la estadística clásica. Por ejemplo, la entropía de un sistema puede escribirse como $S = k \log P$ donde P es el número de divisiones distinguibles de su contenido de energía (es decir, P es una medida de la probabilidad de que tenga esa energía particular). Sin embargo, la entropía clásica contiene una constante arbitraria básicamente debido a la indeterminación del tamaño de la celda. El valor cuántico es exacto, debido a la

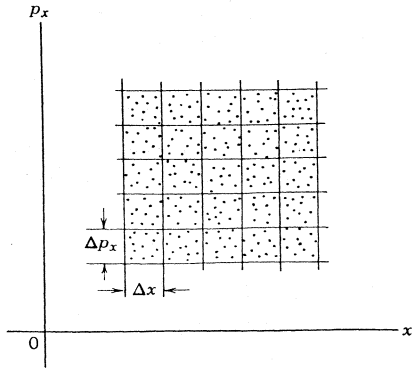


FIGURA 11-12
Espacio fase y puntos representativos para un sistema unidimensional.

definición del tamaño de la celda y proporciona una constante absoluta de entropía en concordancia con las leyes de la termodinámica y los experimentos. De hecho, fué este resultado, y no los relativos a la radiación por una cavidad, los que convencieron a Planck de que sus ideas con respecto a la cuantización de la energía y la constante h, eran correctas. Además, este tamaño mínimo es de una celda en el espacio fase en estadística cuántica, lo que da lugar al factor h^3 que aparece en muchas de las ecuaciones de este capítulo.

De las consideraciones que aquí se han discutido, es posible entender también la aplicabilidad de la distribución de Boltzmann clásica a tantos problemas cuánticos. Si no existe un tamaño mínimo para una celda en el espacio fase, entonces siempre se puede obtener una situación en la que no haya más de una partícula por estado. Pero justamente, este es el caso para altas temperaturas, donde las estadísticas clásica y cuántica concuerdan. La función de distribución clásica es válida en este caso, independientemente de la indistinguibilidad de las partículas. Desde luego que el mundo cuántico real no fija un límite de la pequeñez de la celda, de modo que la distribución clásica no será aplicable cuando el número de partículas por celda sea mayor que uno.

PREGUNTAS

1. Exactamente ¿qué describen los factores de inhibición y crecimiento?

2. ¿Podría diseñarse un ciclo de transiciones entre tres estados que mantuviera el equilibrio en las poblaciones de estos estados, con transiciones que violen el balance detallado?. ¿Sería razonable extender esto a un sistema con muchos estados?

3. ¿Cuál es la razón básica por lo que las distribuciones cuánticas convergen a las distribuciones clásicas a energías mucho mayores que kT?

4. ¿Cómo se explica que el comportamiento de la distribución de Boltzmann es intermedio entre el correspondiente a las distribuciones de Bose y de Fermi?

5. Proporcionar ejemplos de sistemas en donde la distribución de Boltzmann es aplicable, en principio. Como una buena aproximación.

6. ¿Qué factores determinan el valor de α para las tres distribuciones?

7. Interpretar físicamente la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$.

8. La expansión térmica se relaciona con la naturaleza inarmónica de las vibraciones atómicas en un sólido. ¿El modelo de Debye sería apropiado para estudiar la expansión térmica de los sólidos?

9. En el modelo de Debye de un sólido, la frecuencia máxima ν_m corresponde a una longitud de onda mínima. Dada la naturaleza discreta de un sólido, esta longitud de onda mínima corresponde a una vibración en la que los átomos adyacentes se mueven a 180° fuera de fase entre sí. Es decir, la distancia interatómica es media longitud de onda. ¿Esto es posible? Explicar.

10. Interpretar físicamente la temperatura característica de Debye Θ

11. En el análisis de los procesos de absorción y emisión de un átomo en un campo electromagnético, se despreciaron los efectos de retroceso. ¿Cómo afectarían aquellos resultados a estos efectos? ¿Se justifica el que se ignoren dichos efectos?

12. ¿Cuáles son las dimensiones de los coeficientes de Einstein A y B?

13. Se dice que un laser no es una fuente de energía sino un convertidor de energía. Explicar.

14. Se ha ignorado la posible degeneración de los estados implicados en el efecto laser. ¿Cómo se podría tomar en cuenta esto? ¿Qué efecto tendrían?

15. Realizar una comparación paso a paso de la deducción de la ley de radiación de Planck en base a las distribuciones de Maxwell y de Bose.

16. Enlistar las diferencias y semejanzas entre fotones y fonones.

17. A bajas densidades y altas temperaturas, el gas de Bose se comporta como un gas ideal clásico. ¿Físicamente, como es esto posible?

18. Al escribir sobre los experimentos de dipersión de partículas α en helio, Rutherford dijo: "habida cuenta de la imposibilidad de distinguir entre las partículas α dispersadas y los núcleos de He proyectados, los resultados están sujetos a cierta ambigüedad". Explicar cómo el conocimiento de la mecánica estadística cuántica habría eliminado la ambigüedad. ¿Qué es lo que determina que un gas esté sujeto a las distribuciones de Bose o de Fermi?

19. ¿Cómo es el estado ordenado del HeII? ¿Puede explicar su falta de resistencia a la conducción de calor?

20. Además del gas de electrones y el gas de átomos de He^3 ¿qué otros ejemplos hay de un gas de Fermi?

21. En las ecuaciones para un gas ideal se utiliza la masa en reposo de las partículas. ¿Habría necesidad de utilizar alguna vez la masa relativista?. Considérese el efecto de la temperatura y la naturaleza de las partículas.

22. Dar un argumento de plausibilidad para la relación (11-57), entre la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$ y la densidad de electrones libres en un metal.

23. En la distribución de Fermi se obtiene el resultado de que a la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$ el número promedio de partículas por estado cuántico es exactamente un medio. Esto, definitivamente, *no* es lo mismo que decir que 50% de las partículas tienen energías por encima de la energía de Fermi y 50% por debajo. Explicar.

24. Justificar la suposición de que los electrones de conducción se comportan aproximadamente como un sistema de partículas libres sin interacción.

25. ¿Existe alguna conexión entre V_0, profundidad del pozo de potencial para los electrones de conducción en un metal, y los experimentos de difracción de electrones del tipo de Davisson-Germer? ¿Puede determinarse V_0 de tales experimentos?

26. Explicar físicamente el efecto de dejar que $h \to 0$ en la expresión para la densidad de estados, como en (11-49). Explicar físicamente el efecto de dejar que $h \to 0$ en las ecuaciones que contengan el término de degeneración cuántica, como en (11-53).

PROBLEMAS

1. El estado de equilibrio corresponde, en termodinámica, a una entropía máxima S y en estadística, a una probabilidad máxima P. Suponiendo que S es función de P, demostrar que debería esperarse $S = k \ln P$, donde k es una constante universal. A esta relación se conoce como el postulado de Boltzmann. (Sugerencia: considere el efecto de combinar dos sistemas sobre S y P).

2. La distribución de Maxwell se puede obtener observando las colisiones elásticas entre dos partículas. Si estas partículas tienen inicialmente las energías $\mathscr{E}_1$ y $\mathscr{E}_2$, y finalmente $\mathscr{E}_3$ y $\mathscr{E}_4$, entonces

$$\mathscr{E}_3 + \mathscr{E}_4 = (\mathscr{E}_1 - \delta) + (\mathscr{E}_2 + \delta)$$

Si todos los estados posibles son igualmente probables, el número de colisiones por segundo P es proporcional al número de partículas en cada estado inicial, es decir,

$$P_{1,2} = CP(\mathscr{E}_1)P(\mathscr{E}_2)$$

donde $P(\mathscr{E}_i)$ es la probabilidad de que un estado esté ocupado, y C es una constante. Análogamente $P_{3,4} = CP(\mathscr{E}_3)P(\mathscr{E}_4)$. En equilibrio para cada colisión (1,2) $\rightarrow$ (3,4) debe haber una colisión (3,4) $\rightarrow$ (1,2). Por lo tanto $P_{1,2} = P_{3,4}$ (a) Demostrar que $P(\mathscr{E}_i) = e^{-\mathscr{E}_i/kT}$ resuelve esta ecuación. (b) Utilizar un razonamiento similar para derivar la distribución de Fermi. Sin embargo, en este caso los estados iniciales deberán estar llenos y los estados finales deberán estar vacíos y entonces el número de colisiones será:

$$P_{1,2} = CP(\mathscr{E}_1)P(\mathscr{E}_2)[1 - P(\mathscr{E}_3)][1 - P(\mathscr{E}_4)]$$

Después, demostrar que la ecuación $P_{1,2} = P_{3,4}$ puede resolverse por

$$\left[\frac{1 - P(\mathscr{E}_i)}{P(\mathscr{E}_i)}\right] = Ce^{\mathscr{E}_i/kT}$$

de donde se obtiene (11-23).

3. (a) A partir de (11-25) demostrar que el modelo de Einstein para un sólido conduce a un calor específico dado por

$$c_v = 3R\left[\frac{e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2\right]$$

(b) Demostrar que $c_v \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow 0$ pero que a baja T, c_v aumenta como $e^{-h\nu/kT}$ en lugar de la ley T^3 que se requiere.

4. Demostrar que el resultado de Debye para el calor específico, (11-31), se reduce a la ley clásica de Dulong y Petit a altas temperaturas. (Sugerencia: desarrollar en primer lugar ambas exponenciales reteniendo sólo términos de primer orden. Justificarlo).

5. Imaginar una cavidad a temperatura T. Demostrar que el calor específico de la radiación contenida está dado por $(32\pi^5 kV/15)(kT/hc)^3$. Explicar porqué c_v no tiene un límite superior, en este caso, mientras que si lo tiene en el caso de sólidos.

6. En cierta región de temperatura se puede considerar al grafito como un sólido de Debye bidimensional, pero todavía se tienen $3N_0$ modos por mol. (a) Demostrar que $N(\nu)\,d\nu = (2\pi A/v^2)\nu\,d\nu$ donde A es el área de la muestra. (b) Encontrar una expresión para ν_m y Θ para grafito. (c) Demostrar que a bajas temperaturas la capacidad calorífica es proporcional a T^2.

7. $\mathscr{N}$ átomos distinguibles se encuentran distribuídos en dos niveles de energía $\mathscr{E}_1 = 0$ y $\mathscr{E}_2 = \mathscr{E}$. (a) Demostrar que la energía del sistema está dada por

$$E = \frac{\mathscr{N}\mathscr{E}e^{-\mathscr{E}/kT}}{1 + e^{-\mathscr{E}/kT}}$$

(b) Demostrar que c_v está dada por

$$c_v = \frac{\mathscr{N}k\left(\frac{\mathscr{E}}{kT}\right)^2 e^{-\mathscr{E}/kT}}{(1 + e^{-\mathscr{E}/kT})^2}$$

(Este es el calor específico de Schottky y se observa en sólidos paramagnéticos a bajas temperaturas. Los niveles de energía corresponden al alineamiento paralelo o antiparalelo de los momentos magnéticos con respecto al campo magnético). (c) Graficar la capacidad calorífica como función de la temperatura, teniendo cuidado con la dependencia correcta a altas y bajas temperaturas.

8. La variación de la densidad ρ con la altura y de la atmósfera gaseosa de la tierra puede escribirse como $\rho = \rho_0 e^{-g(\rho_0/P_0)y}$, donde ρ_0 y P_0 son la densidad y presión a nivel del mar. (a) A partir de las

leyes para el gas ideal demostrar que lo anterior puede escribirse en la forma $\rho = \rho_0 e^{-mgy/kT}$. (b) Demostrar que esto tiene la forma de la distribución de Boltzmann.

9. (a) Combinando $n(\mathscr{E})$ de (11-21) y $N(\mathscr{E})$ de (11-49) para un gas ideal de partículas clásicas, con

$$A = e^{-\alpha} = \frac{Nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}V}$$

Demostrar que

$$n(\mathscr{E})N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \frac{2N}{(kT)^{3/2}\pi^{1/2}}\,\mathscr{E}^{1/2}e^{-\mathscr{E}/kT}\,d\mathscr{E}$$

es la distribución de energía de las partículas en un gas ideal. (b) Demostrar que de aquí se puede derivar la distribución de Maxwell de velocidades de las moléculas de un gas, que tiene la forma $n(v)\,dv = Cv^2e^{-mv^2/2kT}\,dv$, donde C es una constante.

10. Suponer que los neutrones térmicos que salen de un reactor nuclear tienen una distribución de energía que corresponde a la de un gas ideal a una temperatura de 300°K. Calcular la densidad de neutrones en un haz de flujo $10^{13}/m^2$ seg. (Sugerencia: considerar la velocidad promedio y justificar su uso).

11. En un cierto núcleo, el momento magnético es 1.4×10^{-26} joule-m^2/weber. Calcular la diferencia fraccional en población de los niveles Zeeman nucleares en un campo magnético de 1 weber/ m^2, (a) a temperatura ambiente y (b) a 4°K.

12. La resonancia del spin electrónico es muy parecida a la resonancia magnética nuclear, excepto que las transiciones electrónicas resultan de la excitación de niveles atómicos de Zeeman. Estos experimentos se realizan a la frecuencia de microondas. Si la onda electromagnética tiene una frecuencia de 32KMHz (banda K) calcular la diferencia fraccional de población entre dos niveles atómicos de Zeeman, (a) a temperatura ambiente y (b) a 4°K.

13. (a) Determinar el orden de magnitud de la fracción de átomos de hidrógeno en un estado con número cuántico principal $n = 2$ con respecto a los que están en el estado $n = 1$ en un gas a 300°K. (b) Tomar en cuenta la degeneración de los estados correspondientes a los números cuánticos $n = 1$ y 2 del hidrógeno atómico y determinar a que temperatura, aproximadamente, un átomo de cada cien se encuentra en un estado con $n = 2$.

14. Considerar la relación $n_1/n_2 = e^{(\mathscr{E}_2-\mathscr{E}_1)/kT}$, que es el factor de Boltzmann para estados no degenerados para sistemas en equilibrio, donde $\mathscr{E}_2 > \mathscr{E}_1$ (a) Demostrar que $n_2 = 0$ a T = 0. (b) Demostrar que $n_1 = n_2$ a $T = \infty$ o $T = -\infty$. (c) Demostrar que $n_2 > n_1$ a temperatura T negativa finita. (d) Demostrar que $n_1 \to 0$ cuando $T \to -0$. (e) Por lo tanto, explicar las afirmaciones, "Las temperaturas negativas absolutas no son más frías que el cero absoluto, sino más calientes que una temperatura infinita", y "Uno se acerca a temperaturas negativas por infinito, no por cero". (f) ¿Podría sugerirse un cambio en la escala de temperaturas que evitara la existencia de temperaturas negativas en este sentido?

15. Determinar aproximadamente la razón de la probabilidad para emisión espontánea respecto de la probabilidad de emisión estimulada, a temperatura ambiente en; (a) la región de rayos-X del espectro electromagnético, (b) la región visible y (c) la región de microondas.

16. (a) Demostrar que a $T = 0$, $n(\mathscr{E}) = 1$ en la distribución de Fermi, para todos los estados en que $\mathscr{E} \leq \mathscr{E}_F$ y $n(\mathscr{E}) = 0$ para todos los estados en los cuales $\mathscr{E} > \mathscr{E}_F$. (b) Demostrar que $n(\mathscr{E}) = 1/2$ para $\mathscr{E} = \mathscr{E}_F$.

17. Considerar la distribución de Fermi de (11-24), $n(\mathscr{E}) = 1/[e^{(\mathscr{E}-\mathscr{E}_F)/kT} + 1]$ (a) Demostrar que $n(\mathscr{E}) = 1 - n(2\mathscr{E}_F - \mathscr{E})$; es decir, con $\mathscr{E} - \mathscr{E}_F = \delta$, demostrar que $n(\mathscr{E}_F + \delta) = 1 - n(\mathscr{E}_F - \delta)$. Con esto se prueba que la distribución tiene simetría respecto a $n(\mathscr{E}_F) = 1/2$ (b) Encontrar $n(\mathscr{E})$ para $\delta = \mathscr{E} - \mathscr{E}_F = kT$, $2kT$, o $4kT$, o $10kT$. Hacer una gráfica aproximada de $n(\mathscr{E})$ contra

$\mathscr{E}$ para cualquier $T > 0$. (c) ¿Qué error porcentual se comete al aproximar la distribución de Fermi a la distribución de Boltzmann cuando $\delta/kT = 1, 2, 4, 10$?

18. Combinar (11-49) y (11-47) para obtener (11-50), en la forma siguiente. Sea $x = \mathscr{E}/kT$ y obtener

$$\mathscr{N} = \frac{2\pi V(2mkT)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}\,dx}{e^{\alpha+x} - 1}$$

Despues con α positiva, utilizar las relaciones $(e^{\alpha+x} - 1)^{-1} = e^{-\alpha-x}(1 - e^{-\alpha-x})^{-1} = e^{-\alpha}(e^{-x} + e^{-\alpha-2x} + \cdots)$ para obtener (11-50).

19. Obtener (11-52) en la forma siguiente. Sea $x = \mathscr{E}/kT$ y demostrar que

$$E = \frac{2\pi kTV(2mkT)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}\,dx}{e^{\alpha+x} - 1} = \frac{3}{2}\,kT\,\frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}\,e^{-\alpha}\left(1 + \frac{1}{2^{5/2}}\,e^{-\alpha} + \cdots\right)$$

20. Demostrar que la degeneración cuántica en un gas de Fermi ocurre si $kT \ll \mathscr{E}_F$. (Sugerencia: ver el ejemplo 11-4 y utilizar (11-57).)

21. Demostrar a partir de la distribución de Fermi, que en un metal a $T = 0°\text{K}$ la energía promedio de un electrón es $3\mathscr{E}_F/5$.

22. Utilizando 23 como el peso atómico del sodio metálico y $9.7 \times 10^2\ \text{kg/m}^3$ como su densidad, calcular la energía de Fermi bajo la suposición de que cada átomo de sodio proporciona un electrón a la banda de conducción. (Sugerencia: ver ejemplo 11-5).

23. Utilizando 197 como el peso atómico del oro y $19.3 \times 10^3\ \text{kg/m}^3$ como su densidad, calcular la profundidad del pozo de potencial para electrones libres en oro. La función trabajo es 4.8 eV y hay un electrón libre por átomo.

24. En un sistema unidimensional, el número de estados de energía por unidad de energía es $(l/h)\sqrt{2m/\mathscr{E}}$, donde l es la longitud de la muestra y m es la masa del electrón. Existen $\mathscr{N}$ electrones en la muestra y cada estado puede ser ocupado por dos electrones. (a) Determinar la energía de Fermi a 0°K. (b) encontrar la energía promedio por electrón a 0°K.

25. Demostrar que aproximadamente un electrón de conducción en mil tiene una energía mayor que la energía de Fermi, en plata metálica a temperatura ambiente.

12

Moléculas

12.1 Introducción 485

Importancia de la física molecular.

12.2 Enlaces iónicos 485

Origen electromagnético del enlace molecular; balance energético en el enlace iónico del cloruro de sodio; moléculas polares; no direccionalidad de los enlaces iónicos; candidatos viables para el enlace iónico.

12.3 Enlaces covalentes 488

Papel del ión molecular de hidrógeno; simetría preferente de la eigenfunción para el ión; balance energético en el ión; balance energético en la molécula de hidrógeno; pares de electrones compartidos en el enlace covalente; saturación; direccionalidad en el enlace covalente; moléculas homopolares.

12.4 Espectros moleculares 492

Comparación con los espectros atómicos; descomposición de los espectros y de la estructura de los niveles en electrónicos, vibracionales y rotacionales.

12.5 Espectros rotacionales 493

Cuantización de la energía rotacional, número cuántico *r;* regla de selección; espectros.

12.6 Espectros vibro-rotacionales

Cuantización de la energía vibracional, número cuántico *v;* regla de selección; bandas vibro-rotacionales; efectos isotópicos constantes vibracionales y rotacionales.

12.7 Espectros electrónicos **500**

Espectros de bandas; principio de Franck-Condon.

12.8 El efecto Raman **503**

Descripción; papel del estado intermedio; relación con la dispersión de Rayleigh; utilización en el estudio de moléculas con núcleos idénticos.

12.9 Determinación del spin nuclear y carácter de la simetría **504**

Simetría de los factores de spin nuclear, vibracional y rotacional de las eigenfunciones moleculares; número cuántico i del spin nuclear; moléculas orto y para; alternación de intensidades; líneas faltantes; aplicación a varios núcleos.

Preguntas **508**

Problemas **509**

12

Moléculas

12.1 Introducción

El material contenido en los capítulos anteriores se considera común a toda la física cuántica. Los conceptos y técnicas que se desarrollaron en estos capítulos con el propósito de estudiar los átomos han resultado necesarias, o al menos útiles, en otros campos donde la física cuántica es aplicable. Sin embargo, a partir de los átomos, las aplicaciones de la física cuántica se dividen en dos ramas bastantes bien definidas y separadas. Una de ellas conduce a sistemas más grandes que los átomos, es decir, va de átomos a moléculas y después a sólidos. La otra rama conduce de los átomos a sistemas más pequeños, es decir, a los núcleos y sus constituyentes, las partículas elementales. En los próximos tres capítulos se seguirá la primera rama y en los últimos tres capítulos de este libro, se explorará la segunda.

Se sabe que dos o más átomos se pueden combinar para formar una molécula estable. En lo que se presentará a continuación, se buscará una descripción de las fuerzas interatómicas que enlazan los átomos para formar moléculas, así como entender la naturaleza de los espectros y niveles de energía moleculares. Dado que un número muy grande de átomos se puede unir para formar un sólido, del mismo modo como unos pocos se unen para formar una molécula, el fenómeno del enlace molecular es muy importante para las propiedades de los sólidos. La motivación para el estudio de espectros moleculares, además de su interés intrínseco, radica en consideraciones prácticas. Por ejemplo, un campo nuevo de la ciencia, que se expande rápidamente es la astronomía molecular, que involucra la medición de espectros moleculares que se originan en la materia interestelar o intergaláctica, con el propósito de determinar su composición y condición. Además, como se verá más adelante, las medidas de espectros moleculares han proporcionado, durante mucho tiempo, la fuente primaria de información acerca de propiedades importantes de los núcleos contenidos en la molécula.

12.2 Enlaces iónicos

Desde un punto de vista, una molécula es un arreglo estable de un grupo de núcleos y electrones. El arreglo exacto lo determinan las fuerzas electromagnéticas y las leyes de la mecánica cuántica. Este concepto de molécula es una extensión natural del concepto de átomo. Otro punto de vista considera a la molécula como una estructura estable formada por la asociación de dos o mas átomos. En este punto de vista, los átomos retienen su identidad, mientras que en el primer punto de vista mencionado no lo hacen. Desde luego que ambos puntos de vista son útiles y hay situaciones en las que cada uno es aplicable. Sin embargo, por l-

general la estructura y propiedades de las moléculas se describe mejor por una combinación de ambos puntos de vista. Cuando una molécula se forma de dos átomos, los electrones de las capas internas de cada átomo permanecen fuertemente ligados al núcleo original y casi no son perturbados. Sin embargo, los electrones más externos ligados débilmente, son perturbados fuertemente e influenciados por todas las partículas del sistema (iones + electrones). Al acercarse los átomos entre sí, sus funciones de onda se modifican significativamente. De hecho, es esta la integración que conduce al enlace, es decir, a una energía total menor cuando los núcleos o iones se encuentran muy próximos entre sí. Esta interacción, llamada *fuerza interatómica*, es de origen *electromagnético*. Por lo tanto, se puede ver que los electrones de valencia tienen la importancia principal en el enlace molecular.

Existen dos tipos principales de enlace molecular, el enlace *iónico* y el enlace *covalente*. La molécula de NaCl es un ejemplo de enlace iónico mientras que la molécula de H_2 es un ejemplo de enlace covalente. Considérese la formación de una molécula de NaCl a partir de un átomo de Na y un átomo de Cl que inicialmente se encuentran muy separados. En la figura 9-15 se muestra que para extraer al electrón $3s$ más externo del Na y formar el ión Na^+ se requiere una energía de ionización de 5.1 eV. El enlace atómico en el Na alcalino es relativamente débil, ya que sus capas internas llenas apantallan eléctricamente al electrón de valencia de su respectivo núcleo, de modo efectivo, de manera que puede moverse en un campo más débil y en una posición más externa. Si ahora, este electrón es agregado al átomo de halógeno Cl, éste completará su capa $3p$ previamente incompleta para formar el ión Cl^- El halógeno tiene una afinidad electrónica relativamente alta; es decir, el ión con capa cerrada es más estable que el átomo neutral, ya que su energía se reduce en 3.8 eV. Por lo tanto, a un costo en energía de 1.3

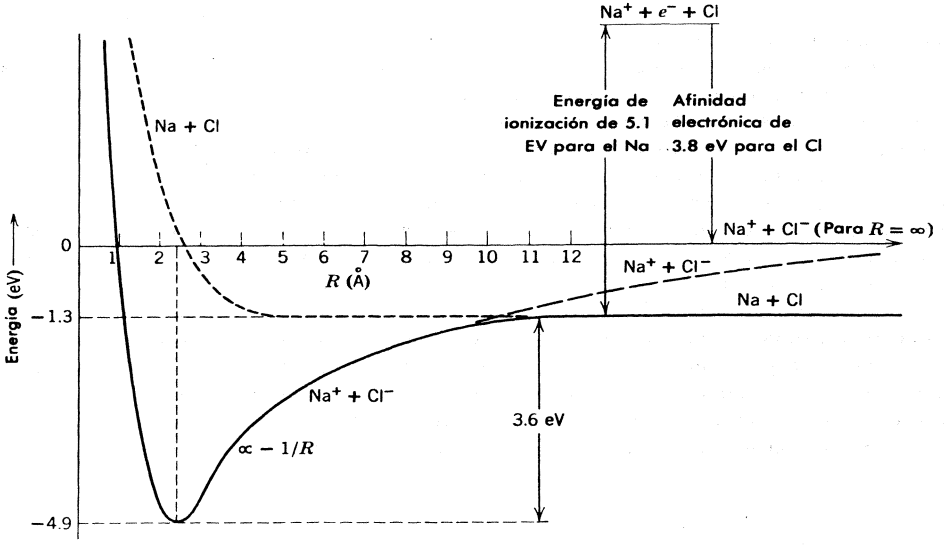


FIGURA 12-1

Energía de los átomos neutrales Na y Cl, y de los iones Na^+ y Cl^-, como función de la distancia de separación internuclear R. La combinación iónica tiene una energía menor a una separación pequeña, mientras que la combinación de átomos neutros tiene menor energía a separaciones grandes. Por lo tanto, a medida que los átomos neutros se aproximan entre sí, pasan a la forma iónica, cuando su separador se vuelve menor que cierto valor.

eV (5.1 eV — 3.8 eV), se han formado dos iones separados distintos, Na^+ y Cl^-; pero estos iones se ejercen mutuamente fuerzas de Coulomb atractivas, y la energía de atracción es mayor que 1.3 eV. Ahora bien, como la energía potencial de Coulomb mutua entre los iones es negativa, inicialmente la energía potencial del sistema combinado decrece a medida que la distancia entre los iones paulatinamente se reduce. Cuando los iones se encuentran aún más próximos entre sí, las distribuciones de carga electrónica empiezan a traslaparse. Esto tiene dos efectos, cada uno de los cuales aumenta la energía potencial: (1) los núcleos ya no se encuentran tan bién apantallados entre sí como antes y empiezan a repelerse y (2) a una separación internuclear pequeña, se tiene un solo sistema de modo efectivo al cual se le aplica el principio de exclusión, por lo que algunos electrones deberán ocupar estados de energía más altos que antes para evitar violar este principio. Por lo tanto, la curva de energía potencial presenta una parte correspondiente a una fuerza repulsiva, a distancias internucleares pequeñas y otra correspondiente a una fuerza atractiva a separaciones grandes. Existe una separación para la cual la energía es mínima y esta energía es 4.9 eV más baja, a esta distancia de separación, que cuando los iones se encuentran separados a una gran distancia. De esta forma, comparando con los dos átomos neutrales, Na + Cl, el sistema combinado NaCl ha bajado su energía 3.6 eV (es decir, $E =$ 1.3eV—4.9eV = —3.6eV), de modo que energéticamente se favorece un estado ligado, tal y como se ilustra en la figura 12-1. La separación nuclear en equilibrio del NaCl es 2.4 Å.

Ejemplo 12-1. En la figura 12-1, evaluar aproximadamente la profundidad del mínimo, suponiendo que a la separación nuclear en equilibrio $R = 2.4$ Å del NaCl, los iones Na^+ y Cl^- poseen distribuciones de carga esféricamente simétrica, que hasta ese punto no se traslapan.

Con esta suposición, la ley de Gauss de la electrostática permite la evaluación de la energía de enlace de Coulomb de los iones con carga unitaria, a partir de la sencilla expresión,

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{R}$$

donde R 2.4eV. Así se obtiene

$$= -\frac{9.0 \times 10^9 \text{ N-m}^2/\text{coul}^2 \times (1.6 \times 10^{-19} \text{ coul})^2}{2.4 \times 10^{-10} \text{ m}}$$

$$= -9.7 \times 10^{-19} \text{ joule} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ joule}}$$

$$= -6.0 \text{ eV}$$

El estudiante podrá verificar que los resultados de esta evaluación son consistentes con las suposiciones, si extrapola hasta $R = 2.4$ Å, el comportamiento $1/R$ en la figura 12-1. ◀

La molécula de NaCl se mantiene unida por medio de enlace iónico. Pero, debido a que las regiones de carga positiva (Na^+) y carga negativa (Cl^-) se encuentran separadas, existe un momento dipolar eléctrico permanente. Por lo tanto, se dice que una molécula iónica es una molécula *polar*. Asimismo a enlace iónico también se le llama *heteropolar*. Los enlaces iónicos no son direccionales, ya que cada ion posee una configuración de capa cerrada que es esféricamente simétrica. Los enlaces iónicos se pueden formar con más de un electrón de valencia, como en el caso del $MgCl_2$ siempre y cuando el estado molecular sea energéticamente más bajo que el correspondiente a los átomos separados. El número de enlaces iónicos que un átomo puede formar, depende de la estructura de las capas electrónicas del átomo, es decir, de los potenciales de ionización para ir sacando electrones sucesivamente. La formación de enlaces iónicos será energéticamente favorable, únicamente para aquellos (pocos) electrones de las capas más externas cuyos potenciales de ionización se encuentran en ciertos intervalos. Los compuestos formados por los elementos de la primera y penúltima columnas de la tabla

periódica, (los halogenuros alcalinos, tales como KCl, LiBr, etc.) son iónicos, así como muchos de los formados con la segunda y antepenúltima columnas (los óxidos de tierras alcalinas, sulfuros, etc.).

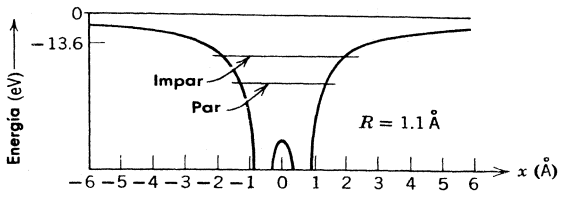
12.3 Enlaces covalentes

Considérese ahora la formación de la molécula de H_2 Si en el caso de H_2 se calculara la energía necesaria para formar iones de hidrógeno negativos y positivos, moviendo un electrón de uno de los átomos de hidrógeno al otro y sumando después la energía de Coulomb de la interacción entre iones, se encontraría que no existe una distancia de separación para la cual la energía total sea negativa. Es decir, el enlace iónico *no* ocurre en una molécula ligada de H_2. El hecho de que H_2 *esté* ligada se explica en mecánica cuántica por el comportamiento de las eigenfunciones electrónicas que describen la distribución de carga del sistema, cuando dos átomos de hidrógeno se aproximan entre sí. Como pronto se verá, la distribución de carga resultante conduce, en efecto, a una atracción electrostática, pero esta distribución de carga se puede interpretar como un compartimiento de electrones entre ambos átomos. El enlace se le denomina *covalente.*

En el enlace covalente puede entenderse mejor si se trata primero el caso más sencillo que es el del ion molecular de hidrógeno, H_2^+. En este caso se tienen dos núcleos, cada uno de los cuales ejerce una repulsión de Coulomb sobre el otro y ambos ejerciendo una atracción de Coulomb sobre un sólo electrón. Dado que el movimiento del electrón es muy rápido comparado con los movimientos nucleares, el procedimiento a seguir es suponer que los núcleos se encuentran en reposo a una distancia de separación R y el electrón moviéndose en sus campos de Coulomb, para después determinar la energía del electrón a partir de la ecuación de Schrödinger Enseguida, se trata a R como una variable y se consideran tanto a la energía del electrón como la energía de repulsión de Coulomb internuclear, como funciones de la separación internuclear. La energía total del sistema será la suma de estas dos energías y el sistema estará ligado si la energía total exhibe un mínimo para algún valor de la separación internuclear.

En la parte superior de la figura 12-2 se indica la energía potencial en la que se mueve el electrón, graficando su valor a lo largo de un eje x que pasa a través de los dos núcleos, para una separación internuclear $R = 1.1$ Å. La energía potencial es simétrica con respecto a un plano perpendicular a la línea que conecta los dos núcleos y que pasa por su punto medio, ya que el potencial es la suma de un potencial de Coulomb centrado en un extremo de esa línea y un potencial de Coulomb igual centrado en el otro extremo. Las densidades de probabilidad $\psi^*\psi$ para un estado ligado del electrón, tendrán valores iguales en dos puntos a ambos lados del plano y equidistantes de él, ya que el movimiento del electrón en un estado ligado de este potencial tendrá la misma simetría. Sin embargo, este requiere que cada una de sus eigenfunciones ψ tengan precisamente el mismo valor en ambos puntos, o bien, que en un punto tenga un valor que sea precisamente el negativo del valor en el otro punto. Es decir, las eigenfunciones deberán ser *par* o *impar* con respecto a reflexiones en el plano. La situación se muestra esquemáticamente en la parte inferior de la figura 12-2 donde se grafican las eigenfunciones normalizadas par e impar de mínima energía a lo largo de una línea que pasa por los dos núcleos. La idea importante es que la eigenfunción impar necesariamente deberá tener valor cero en el centro de esta línea ya que obedece la ecuación $\psi(-x) = -\psi(x)$, que de otra manera sería inconsistente en el centro donde $x = 0$. Sin embargo, la eigenfunción impar no está tan restringida y por lo tanto tiene un valor apreciable en $x = 0$.

Dado que un electrón con densidad de probabilidad $\psi^*\psi$ con eigenfunción impar debe evitar el centro de la molécula, evita hasta cierto punto, la región central. Como la integral de $\psi^*\psi$ sobre todo el espacio es igual a uno, si esa cantidad es relativamente pequeña en la región entre los núcleos, deberá ser relativamente grande en las regiones fuera de los núcleos. En estas regiones externas es donde el potencial es menos ligante y ese electrón se encuentra relativamente poco ligado. La eigenfunción impar podría estar más concentrada en las regiones



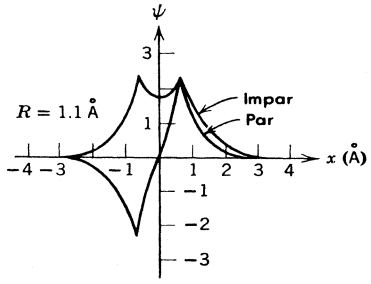


FIGURA 12-2
Arriba: Función potencial y los dos niveles de energía más bajos, para un electrón de la molécula de H_2^+ cuya separación internuclear es $R = 1.1$ Å. La función potencial se evalúa a lo largo de la línea que pasa por los dos núcleos. *Abajo:* Eigenfunciones par e impar correspondientes a los dos niveles de energía, calculadas a lo largo de la línea internuclear. En la vecindad de cada núcleo, ambas eigenfunciones tienen magnitudes que son exponenciales decrecientes de la distancia al núcleo, como en el estado base del átomo de hidrógeno.

cercanas a los núcleos y aún ser cero en el centro, pero sólo si su curvatura fuera mayor. Como una curvatura mayor requiere de mayor energía cinética, esto no disminuiría la energía total del electrón. Cuando el comportamiento de un electrón queda descrito por la densidad de probabilidad con eigenfunciones pares, éste tiene una probabilidad relativamente alta de encontrarse en la región donde el potencial es más ligante, es decir, en la región que va desde la vecindad de un núcleo, pasando por el centro de la molécula, hasta la vecindad del otro núcleo. Por lo tanto, un electrón tal se encuentra fuertemente ligado. En la figura 12-2 se muestran los dos niveles de energía más bajos para un electrón en dicho potencial. Ahora puede verse porqué el más bajo de estos niveles corresponde al estado cuántico en el que las eigenfunciones son pares.

En la figura 12-3 se muestra la suma de la energía del electrón con la energía de repulsión de Coulomb para los dos estados de energía más bajos de la molécula H_2^+, como función de la distancia internuclear R. Para R muy grande, el electrón estará ligado a uno u otro de los núcleos en el estado de energía más bajo de un átomo de H y la energía de repulsión será despreciable, de modo que la energía del sistema tendrá el familiar valor de —13.6 eV. Para el

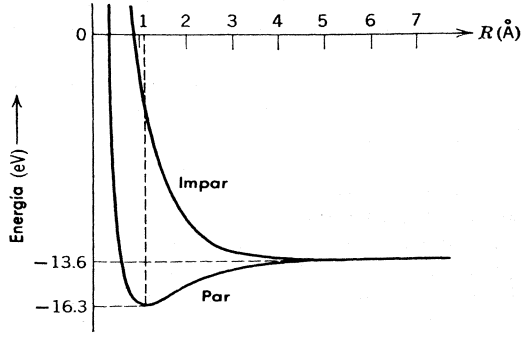


FIGURA 12-3
Energía total de la molécula de H_2 correspondiente a los dos niveles de energía electrónicos mas bajos, como función de la separación internuclear. La molécula queda ligada solamente en el estado en el que las eigenfunciones electrónicas son pares.

estado cuántico con eigenfunción par, la energía del sistema decrece, en un principio, cuando R decrece. La razón es que la energía enlace ejercida sobre un electrón cercano a un núcleo se vuelve más negativa más rápidamente a medida que el otro núcleo se le aproxima, entonces, la energía de repulsión entre los núcleos se vuelve positiva. (El electrón en el estado con eigenfunción par a separación internuclear moderada tiende a estar enmedio de los núcleos, de modo que su distancia a cualquiera de los núcleos es menor que la distancia que separa a los núcleos). A medida que la separación internuclear continúa decreciendo, la energía del sistema pasa por un mínimo y después empieza a crecer rápidamente. Esto sucede porque la energía de enlace del electrón cuando los núcleos se traslapan no puede hacerse más negativa que $-(2)^2 \times 13.6\ \text{eV} = -54.4\ \text{eV}$, que corresponde a la energía del estado base de un átomo de helio ionizado una sola vez, mientras que la energía de repulsión internuclear aumenta sin límite cuando la separación internuclear disminuye. Para el caso de la eigenfunción par, la molécula queda establemente ligada por medio de un enlace covalente rudimentario. En equilibrio, tiene $R \simeq 1.1$ Å, que es donde la energía como función de R tiene un mínimo de aproximadamente 2.7 eV de profundidad. La energía de enlace medida, es decir, la energía necesaria para disociar H_2 en H y H$^+$, concuerda bastante bien con este valor. En el caso del estado con eigenfunción impar, la curva de energía molecular total correspondiente, no posee un mínimo para ningún valor de R, debido a que el electrón se encuentra significativamente ligado en forma más débil. Por lo tanto, la molécula no estará ligada si la eigenfunción del electrón es impar, ya que su energía siempre disminuye cuando la separación nuclear aumenta.

Si ahora se agrega un segundo electrón a H_2^+ para formar H_2, la energía del sistema disminuye aún más, de modo que las fuerzas atractivas adicionales que actúan entre este electrón y los núcleos se contraponen a la repulsión electrón-electrón. Para H_2 la energía de enlace es aproximadamente 4.7 eV y la separación internuclear en equilibrio es aproximadamente 0.7 Å. De esta manera, H_2 es más compacta y más fuertemente ligada que H_2^+. El segundo electrón en H_2 se coloca en un estado cuántico cuya eigenfunción tiene las mismas propiedades espaciales que la eigenfunción del primer electrón. Es decir, en el estado de energía más baja de H_2 ambos electrones se encuentran en un estado con la misma eigenfunción espacial, y esa eigenfunción es par con respecto a una reflexión en el plano que queda a la mitad de la distancia entre los núcleos, así que la densidad de probabilidad para ambos muestra una concentración en la región entre los dos núcleos. Desde luego que el principio de exclusión demanda que los dos electrones tengan diferentes eigenfunciones de spin; por lo tanto, tienen spin con componentes z opuestas. Utilizando la terminología más precisa de la sección 9-3, la eigenfunción que describe a un sistema de dos electrones indistinguibles, es el producto de una eigenfunción espacial simétrica y la eigenfunción de spin antisimétrica (es decir, singulete). En esa sección se encontró que los dos electrones pueden encontrarse relativamente juntos cuando el sistema está descrito por una eigenfunción así. Desde luego que esto es consistente con la idea de que ambos tienen una probabilidad razonable de ser localizados cerca del punto medio entre los núcleos.

Debido al traslape total de las funciones de onda espaciales de los electrones indistinguibles en H_2, no es posible asociar, definitivamente, a un electrón particular con un átomo particular de la molécula. Por el contrario, los dos electrones que son los causantes del enlace que une a los átomos entre sí como molécula, son compartidos por la molécula o compartidos por el enlace mismo. Esta es la idea del *par de electrones compartidos con spin "antiparalelos" que forman un enlace covalente.* Nótese que si los dos electrones tuvieran esencialmente spin paralelos no podrían estar en la región entre los dos núcleos. Por lo tanto, no podrían estar en donde optimizan la atracción que ejercen sobre ellos ambos núcleos. Si imaginariamente se trata de formar H_2 acercando dos átomos de H separados, el que los spin de los electrones sean "paralelos" o "antiparalelos" producirá una diferencia decisiva. En la figura 12-4 se muestra la predicción de la mecánica cuántica para la energía total del sistema como función de la separación internuclear para las dos posibilidades; el enlace se obtiene sólo para spin

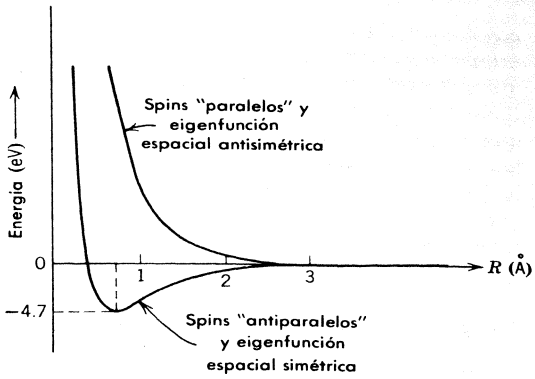


FIGURA 12-4
Energía total de la molécula de H_2 para spin electrónicos "paralelos" y "antiparalelos", como función de la separación internuclear. La molécula queda ligada solamente en el estado en que los spin electrónicos son "antiparalelos".

"antiparalelos". Los cálculos que produjeron las curvas en la figura 12-4 toman en cuenta la repulsión electrón-electrón. Lo anterior tiene un efecto cuantitativo en tanto que reduce el enlace pero no produce un cambio cualitativo en la descripción presentada del origen de enlace covalente.

No más de dos electrones pueden formar un enlace covalente. Se dice que un electrón de un átomo se *aparea* con un electrón de spin "*antiparalelo*" de otro átomo. Si un átomo tiene varios electrones en una capa externa incompleta, es decir, si tiene varios electrones de valencia, cada uno tratará de formar un enlace covalente con un electrón de valencia en un átomo vecino. Sin embargo, si en un átomo se tienen dos electrones de valencia con spin "antiparalelos", un electrón de valencia adicional de otro átomo no se podrá enlazar con ninguno de ellos ya que éstos se encuentran apareados entre sí. Es decir, si el spin del electrón adicional es "antiparalelo" al spin de uno de estos electrones, será "paralelo" al spin del otro. El electrón adicional no podrá ocupar la misma región molecular energéticamente favorable que los electrones del par que ya existe, ya que el principio de exclusión actúa en la molécula de tal manera, que previene que dos electrones con spin "paralelos" tengan la misma eigenfunción espacial. Así pues, los electrones de valencia de un átomo que son efectivos en la formación de enlaces covalentes son aquellos que la acción del principio de exclusión en el átomo no los ha forzado de antemano a formar parejas con spin "antiparalelos". Por ejemplo, en la teoría de Hartree los tres electrones $2p$ en N pueden tener spin "paralelos" ya que existen tres valores posibles para el número cuántico m_l para $l = 1$, de modo que ninguno de ellos está forzado a aparearse en ese átomo. (En la teoría de la interacción residual de Coulomb, los tres electrones *si* tienen spin "paralelos" en el estado base del átomo N con acomplamiento *LS*). El resultado es que la molécula N_2 tiene tres enlaces covalentes. Sin embargo, O tiene un cuarto electrón en la subcapa $2p$ y el principio de exclusión lo fuerza a tener su spin "antiparalelo" al spin de uno de los otros tres. Por lo tanto, sólo hay dos electrones de valencia no apareados en O, y la molécula O_2 sólo tiene dos enlaces covalentes. En general, el número de electrones de valencia no apareados es igual al número de electrones en la subcapa hasta el punto en que ésta se llena a la mitad y es igual al número de lugares vacíos, o agujeros más allá de este punto.

Como en el caso del enlace iónico, las fuerzas *se saturan* en el enlace covalante. Es decir, un átomo dado sólo interactúa con un número limitado de otros átomos. La saturación se debe al número limitado de electrones o vacantes en las subcapas ocupadas más externas del átomo. A diferencia del enlace iónico, el enlace covalente es *direccional*. La propiedad direccional no está presente en H_2 ya que la densidad de probabilidad del electrón de valencia en cada átomo de H separado es esféricamente simétrica, así que la única dirección definida en la molécula H_2 es la que conecta a los dos núcleos y el enlace covalente actúa a lo largo de esa dirección, cualquiera que esta sea. En un caso más típico, la densidad de probabilidad de un electrón de valencia tiene su propia dependencia direccional y ciertas direcciones preferentes para formar enlaces

covalentes. Las propiedades direccionales de los enlaces covalentes se manifiestan en las propiedades estructurales de las moléculas covalentemente ligadas, formando así la base de la química orgánica. La distribución de carga de los electrones apareados en un enlace covalente tiene una simetría respecto al centro de la molécula, como se estudió en el caso de H_2, de modo que no hay un momento dipolar eléctrico permanente asociado con el enlace covalente. Por lo tanto, algunas veces este tipo de enlace se le llama *homopolar*. Estrictamente hablando sólo moléculas como O_2 y N_2 son homopolares ya que el enlace en moléculas que no sean aquellas que contienen dos núcleos idénticos puede ser parcialmente iónico, aunque principalmente covalente.

12.4 Espectros moleculares

Las moléculas pueden permanecer ligadas tanto en estados excitados como en el estado base. Los espectros de absorción y emisión de las moléculas se deben a transiciones entre estados de energía permitidos. El esquema de niveles de energía es relativamente complicado y difiere en muchos aspectos del caso atómico. En primer lugar, ya no es posible clasificar estados de acuerdo con el impulso angular orbital electrónico. La magnitud de su impulso angular orbital L, no se conserva ya que la fuerza sobre un electrón no es una fuerza central (por ejemplo, en una molécula diatómica existen dos centros atractivos nucleares separados). Con las palabras de la sección 7-9, las eigenfunciones de la energía no son eigenfunciones del operador L^2_{op}. Sin embargo en una molécula diatómica la distribución de carga total es simétrica respecto a un eje que conecta los núcleos, digamos el eje z, de modo que la componente de impulso angular respecto de este eje, L_z, se conserva. Entonces, se encuentra que las eigenfunciones de la energía molecular son eigenfuciones de $L_{z_{\text{op}}}$ y que L_z tiene valores permitidos que son múltiples enteros de n, en analogía con los valores $m_l h$ de los estados atómicos.

Otra diferencia entre los casos atómico y molecular es que en un átomo podía despreciarse el movimiento nuclear, o bien, podía tomarse en cuenta, de modo simple, utilizando la masa reducida del electrón. Desde luego que tanto en una molécula como en un átomo, no es necesario tomar en cuenta el movimiento traslacional, ya que dicho movimiento, siendo de partícula libre, no está cuantizado. Sin embargo, en una molécula los núcleos pueden moverse relativamente entre sí. En una molécula diatómica, por ejemplo, los núcleos pueden vibrar respecto a la separación de equilibrio y además el sistema total puede rotar respecto a su centro de masas. En cada uno de estos movimientos, vibracional y rotacional, la energía esta cuantizada por lo que se esperan muchos más niveles de energía en una molécula que en un átomo. En efecto estos movimientos interactúan o se acoplan entre sí y un análisis exacto deberá tomar esto en cuenta.

Desde luego que la solución de la ecuación de Schrödinger para cualquier molécula, exceptuando la más simple, es muy difícil. Sin embargo, resultados empíricos de espectroscopía molecular demuestran que la energía de una molécula puede considerarse formada de tres partes principales (electrónica, vibracional y rotacional). Los niveles de energía moleculares quedan en grupos ampliamente separados, y se dice que cada grupo corresponde a un estado electrónico diferente de la molécula. Para un estado electrónico dado, los niveles quedan en grupos separados por intervalos de energía casi iguales; se dice que estos corresponden a estados sucesivos de vibración de los núcleos. Dentro de un estado vibracional existe una estructura fina de niveles adscritos a diferentes estados de rotación de la molécula. Esta estructura de niveles sugiere que se puede obtener una solución aproximada de la ecuación de Schrödinger separándola en tres ecuaciones, una que describe el movimiento de los electrones, otra la vibración de los núcleos y otra la rotación de los núcleos. En el siguiente enfoque puede tomarse en cuenta el acoplamiento entre los movimientos electrónico y nuclear, tal como el que existe entre el impulso angular electrónico y la rotación de la molécula y el acoplamiento entre la vibración nuclear y los movimientos rotacionales.

El espectro emitido por una molécula se puede dividir en tres intervalos espectrales correspondientes a los tres diferentes tipos de transición entre los estados cuánticos moleculares. En el infrarrojo lejano se observan los espectros rotacionales que corresponden a la radiación emitida en transiciones entre estados rotacionales de una molécula que posee un momento dipolar eléctrico. En el infrarrojo cercano se observan espectros vibrorrotacionales correspondientes a la radiación emitida en transiciones vibracionales de moléculas que poseen momentos dipolares eléctricos y en las cuales también ocurren cambios en los estados rotacionales. En la región visible y ultravioleta del espectro se observan espectros electrónicos, correspondientes a la radiación emitida en transiciones electrónicas. Las vibraciones electrónicas realizan muchos ciclos en el tiempo requerido para que una configuración nuclear cambie (siendo ésta la razón física que permite, en principio, separar la eigenfunción en un factor electrónico y un factor nuclear), de modo que los espectros electrónicos poseen una estructura fina determinada por el estado rotacional y vibracional de los núcleos durante las transiciones electrónicas.

En las secciones siguientes se examinará el movimiento y los espectros de moléculas diatómicas para de allí extraer información valiosa acerca de sus propiedades.

12.5 Espectros rotacionales

El movimiento rotacional de una molécula diatómica puede visualizarse como la rotación de un cuerpo rígido con respecto a su centro de masas como se muestra en la figura 12-5. El centro de masas se encuentra sobre el eje que conecta los núcleos y el impulso angular asociado con la rotación es un vector que pasa por el centro de masas en el eje de rotación perpendicular al eje internuclear. La rotación respecto al eje internuclear mismo es despreciable. La inercia rotacional, o momento de inercia respecto al eje de rotación debido a los núcleos es $I = \mu R_0^2$, donde R_0 es la separación (en equilibrio) entre los núcleos y μ es la masa reducida del sistema. La energía rotacional es, clásicamente, $E_r = L^2/2I$ donde L es el impulso angular del sistema respecto al eje de rotación, como se prueba en el pie de la figura 12-5. De la cuantización de la magnitud del impulso angular se obtiene $L^2 = r(r + 1)\hbar^2$ con el *número cuántico rotacional* $r = 0, 1, 2, \ldots$, de modo que

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} r(r + 1) \tag{12-1}$$

La separación de niveles rotacionales sucesivos estará dada en energía por

$$\Delta E_r = E_r - E_{r-1} = \frac{\hbar^2}{2I} [r(r + 1) - (r - 1)r] = \frac{\hbar^2}{I} r \tag{12-2}$$

La cantidad $\hbar^2/I$ para una molécula típica, tiene un valor aproximado entre 10^{-4} eV y 10^{-3} eV, de modo que se requiere de poca energía para elevar la molécula a un estado excitado rotacional. Por ejemplo, a temperatura ambiente la energía traslacional térmica de las moléculas es de 2.5×10^{-2} eV, así que las colisiones ordinarias pueden transferir la energía de excitación necesaria. A una temperatura dada, las poblaciones de estados rotacionales obedecen la distribución de Boltzmann, ya que como cada población es pequeña se distribuye en muchos estados.

Si la molécula posee un momento dipolar eléctrico, como todas las moléculas diatómicas que no tienen núcleos idénticos, se pueden observar espectros rotacionales de emisión y absorción. La emisión de radiación se debe a la rotación del dipolo eléctrico, mientras que la absorción de radiación es debida a la interacción de este dipolo con el campo eléctrico de la radiación incidente. Para la radiación del dipolo eléctrico, las transiciones permitidas entre estados son

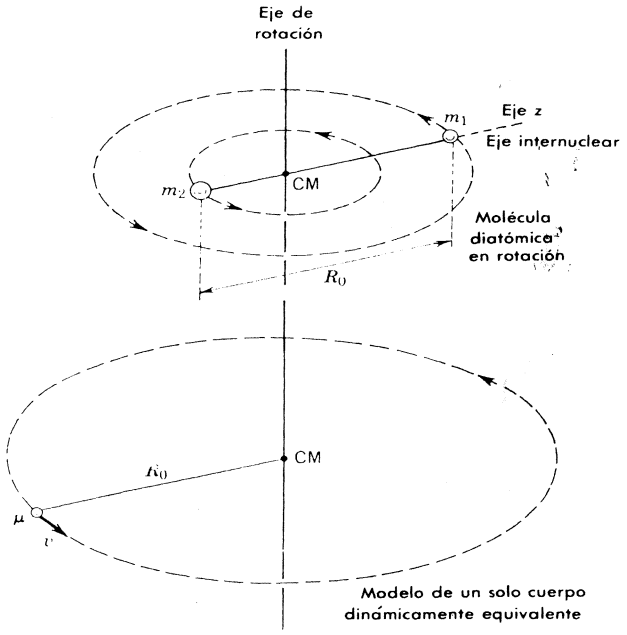


FIGURA 12-5

Arriba: Imagen simplificada de una molécula diátomica, consistiendo de dos masas m_1 y m_2 girando en torno a su centro de masas común (CM) y separadas una distancia R_0. *Abajo:* Un modelo dinámico equivalente que consiste de una masa reducida $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ girando a una distancia R_0 de un punto fijo. Si v es la velocidad de la masa reducida μ, entonces, su energía cinética de rotación estará dada por $E_r = \mu v^2/2$ y su impulso angular será $L = \mu v R_0$. De esta manera $E_r = \mu L^2/2\mu^2 R_0^2 = L^2/2\mu R_0^2 = L^2/2I$, donde $I \equiv \mu R_0^2$ es su inercia rotacional o momento de inercia.

las dadas por la regla de selección análoga a la del impulso angular orbital en transiciones atómicas, a saber, $\Delta r = \pm 1$. Las longitudes de onda λ se obtienen (12-2) y de

$$\Delta E_r = hv$$

Es decir,

$$\frac{\hbar^2}{I} r = \frac{hc}{\lambda}$$

o bien,

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\hbar}{2\pi Ic} r \qquad (12\text{-}3)$$

en donde r es el número cuántico del estado rotacional más alto. La separación de las líneas espectrales (en términos de longitudes de onda recíprocas), con $\Delta r = \pm 1$, será entonces, $\Delta(1/\lambda) = \hbar/2\pi Ic$, que es una constante, como se muestra en la figura 12-6. A partir de medidas de esta separación se obtiene el valor de I, la inercia rotacional de la molécula, y de aquí se puede estimar el valor de la separación internuclear en equilibrio R_0. Por ejemplo, en el caso del HCl

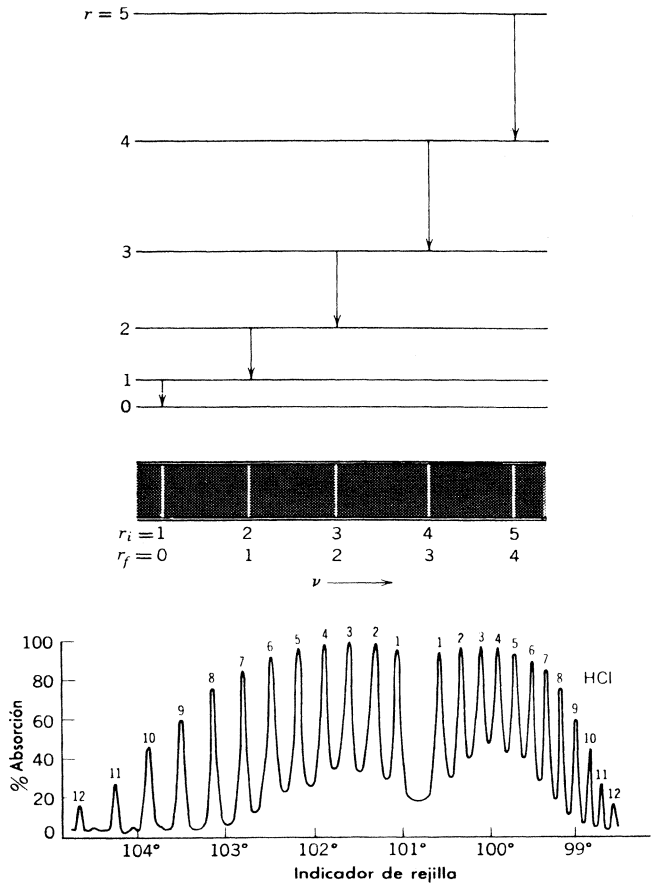


FIGURA 12-6

Arriba: Diagrama esquemático de niveles de energía para los estados de energía rotacionales de una molécula diatómica, y el espectro de emisión de frecuencias correspondiente a las transiciones permitidas. *Abajo:* Espectro de absorción rotacional para HCl gaseoso, que muestra el porcentaje de absorción como función de una medida relacionada con la longitud de onda recíproca.

se encuentra que $\hbar/2\pi Ic = 2079.4\ \text{m}^{-1}$, de donde se obtiene $I = 2.66 \times 10^{-47}\ \text{kg-m}^2$; de las masas conocidas de H y Cl se obtiene $R_0 = 1.27 \times 10^{-10}$ m como medida de la distancia de separación de los átomos en la molécula. Los espectros rotacionales puros caen en el extremo infrarrojo o en la región de microondas, ya que las longitudes de onda correspondientes, λ aproximadamente son de 1mm a 1cm. En la figura 12-6 se muestra un ejemplo. Las moléculas diatómicas con núcleos idénticos, como O_2, dado que no poseen momentos dipolares eléctricos, no presentan espectros rotacionales puros.

Ejemplo 12-2. (a) Encontrar el cociente entre n_r, número de moléculas en el nivel rotacional r, y n_0, número en el nivel $r = 0$, para una muestra que se encuentra en equilibrio a la temperatura T.

Del factor de Boltzmann se tiene que

$$\frac{n_r}{n_0} = \frac{\mathcal{N}_r}{\mathcal{N}_0} e^{-(E_r - E_0)/kT}$$

en donde las $\mathcal{N}$'s son factores de degeneración, o número de estados cuánticos degenerados para cada nivel de energía. Para la energía E_r existen $2r + 1$ estados que corresponden al número de valores posibles del número cuántico de la componente z, m_r asociado con cada valor de r. Por lo tanto, $\mathcal{N}_r = 2r + 1$ y $\mathcal{N}_0 = 1$, de modo que

$$\frac{n_r}{n_0} = (2r + 1)e^{-(E_r - E_0)/kT}$$

(b) Demostrar que la población de niveles de energía rotacional primeramente aumenta cuando r aumenta pero después disminuye a medida que r continúa aumentando.

De (12-1) se tiene que $E_r = (\hbar^2/2I)r(r + 1)$ y $E_0 = 0$, de modo que

$$n_r = n_0(2r + 1)e^{-(\hbar^2/2IkT)r(r+1)}$$

ahora bien, a medida que r aumenta el factor $2r + 1$ aumenta mientras que el factor exponencial disminuye. Para r grande el término exponencial domina así que al principio n_r aumenta con r, pero pronto la exponencial suprime el aumento y n_r disminuye para r más grande. Por ejemplo, para HBr a temperatura ambiente, n_r es máxima en $r = 3$ con $n_3/n_0 \simeq 4$, mientras que cuando $r = 9$ se tiene que $n_9/n_0 \simeq 1/2$.

(c) Relacionar estas poblaciones con las intensidades de las líneas rotacionales.

Considerando el espectro de absorción, la probabilidad de que una frecuencia particular sea absorbida es proporcional al número de moléculas en el nivel de energía rotacional inicial. Por lo tanto, las variaciones de intensidad de las líneas de absorción ($\Delta r = +1$) son proporcionales a las poblaciones de los niveles de energía rotacional iniciales (ver la figura 12-6). El estudiante podría construir un argumento similar para el espectro de emisión. ◀

12.6 Espectros vibro-rotacionales

Desde luego, como se supuso anteriormente, los núcleos no mantienen una separación fija, así que la molécula no es como un cuerpo girando, sino que esto es mas bien una aproximación a la realidad. En efecto, la inercia rotacional I cambia del valor supuesto anteriormente, cuando la molécula gira ya que la distancia internuclear se alarga. Asimismo, los núcleos vibran respecto a alguna separación de equilibrio y este movimiento vibracional está cuantizado. En lo siguiente, se considerará el movimiento vibracional.

Para una configuración electrónica dada se tiene una curva de energía potencial cuyo mínimo se encuentra a una separación de equilibrio R_0. Cerca de R_0 la curva es casi una parábola, de modo que las oscilaciones pequeñas son armónico-simples. La energía de esas oscilaciones está cuantizada y de acuerdo con (6-89) satisface

$$E_v = (v + 1/2)h\nu_0 \tag{12-4}$$

con el *número cuántico vibracional* $v = 0, 1, 2, 3, \ldots$, y donde la frecuencia de vibración clásica es $\nu_0 = (1/2\pi)\sqrt{C/\mu}$. Obsérvese que los niveles de energía, en este caso, se encuentran igualmente espaciados y que existe una energía del punto-cero $(1/2)h\nu_0$. La separación $h\nu_0$ es igual a 0.04 eV para NaCl y dado que la energía de disociación es aproximadamente 1 eV, existen aproximadamente veinte niveles vibracionales en el pozo de potencial. En realidad, al aumentar la energía la curva de energía potencial se vuelve inarmónica de modo que los niveles de energía ya no están igualmente separados sino que se van aproximando unos a otros. Los niveles rotacionales se encuentran aún más próximos, como se vió anteriormente, habiendo aproximadamente cuarenta niveles rotacionales para NaCl, y aproximadamente cincuenta para HCl, entre cada par de niveles vibracionales.

Ejemplo 12-3. (a) Dado que para una molécula de HCl vibrando la constante de fuerza equivalente C, es aproximadamente 470 N/m, estimar la diferencia de energías entre el primero y el más bajo de los niveles vibracionales del HCl.

Para HCl, se tiene que

$$\mu = \frac{35}{36} m_{\text{H}} \qquad \text{y} \qquad C = 470 \text{ nt/m}$$

y también

$$m_{\text{H}} = \frac{1}{6.02 \times 10^{23}} \text{g} = \frac{1}{6.02 \times 10^{26}} \text{kg}$$

De (12-4) se tiene que $\Delta E = h\nu_0$, donde $\nu_0 = (1/2\pi)\sqrt{C/\mu}$. Por lo tanto, utilizando estos datos se obtiene que la diferencia de energía es $h\nu_0 = (h/2\pi)\sqrt{C/\mu} = 0.59 \times 10^{-19}$ joule $= 0.37$ eV.

(b) Si la inercia rotacional de HCl tiene el valor $I = 2.66 \times 10^{-47}$ kg-m^2, estimar la diferencia en energía entre el nivel más bajo y el primer estado excitado rotacional de HCl.

Como $E_r = (\hbar^2/2I)r(r + 1)$, el estado rotacional más bajo tiene una energía $E_0 = 0$ y el primer estado excitado rotacional tiene una energía $E_1 = (\hbar^2/2I)2 = \hbar^2/I$. Entonces, la diferencia de energía requerida es $\Delta E = \hbar^2/I$. Por lo tanto,

$$\frac{\hbar^2}{I} = \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg})^2}{(2\pi)^2 \times 2.66 \times 10^{-47} \text{ kg-m}^2} = 4.2 \times 10^{-22} \text{ joule} = 2.6 \times 10^{-3} \text{ eV}$$

En consecuencia, la diferencia de energía entre los dos niveles vibracionales más bajos es mayor por un factor de 142 (es decir, $0.37/2.6 \times 10^{-3}$) que la correspondiente a los dos niveles rotacionales más bajos de HCl.

(c) A temperatura ambiente, las colisiones de moléculas de HCl en un gas pueden transferir suficiente energía cinética en energía interna, para excitar muchos estados *rotacionales*. ¿A qué temperatura el número de moléculas en el primer estado excitado vibracional sería igual a $1/e$ (aproximadamente 37%) del número en el estado base vibracional?

Se tiene que

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{\mathcal{N}_1}{\mathcal{N}_0} e^{-(E_1 - E_0)/kT}$$

donde los subíndices se refieren a $v = 1$ o $v = 0$. Los estados vibracionales no son degenerados así que $\mathcal{N}_1 = 1 = \mathcal{N}_0$. Asimismo $(E_1 - E_0) = h\nu_0$ de modo que

$$\frac{n_1}{n_0} = e^{-h\nu_0/kT}$$

y si $kT = h\nu_0$

$$n_1 = n_0 e^{-1}$$

por lo tanto,

$$T = \frac{h\nu_0}{k} = \frac{0.59 \times 10^{-19} \text{ joule}}{1.38 \times 10^{-23} \text{ joule/°K}} \simeq 4300°\text{K}$$

es la temperatura para la cual el número de moléculas de HCl en el primer estado excitado vibracional es aproximadamente 37% del número en el estado base. Evidentemente, el número de moléculas de HCl en el estado $v = 1$ a temperatura ambiente es despreciable comparado con el número en el estado base. ◀

Si las moléculas, como HCl o NaCl, tienen momentos dipolares eléctricos permanentes a la separación internuclear de equilibrio, presentarán espectros vibracionales de emisión y absorción debido a las oscilaciones en el momento dipolar eléctrico que resulta de oscilaciones en la separación nuclear. La regla de selección para transiciones del dipolo eléctrico es

$\Delta v = \pm 1$ de modo que $\Delta E_v \simeq h\nu_0$. Las líneas espectrales resultantes se encuentran en el infrarrojo, entre 8000 Å y 50,000 Å para la mayoría de las moléculas. Las moléculas diatómicas con núcleos idénticos no poseen espectros vibracionales porque no poseen momentos dipolares eléctricos a ninguna separación nuclear. En una transición vibracional, la molécula puede cambiar también su estado rotacional, así que cambios vibracionales realmente producen un espectro combinado vibración-rotación. La transición vibracional determina la región de longitudes de onda del espectro y las transiciones rotacionales determinan la separación de las líneas. El espectro consiste en una banda de líneas, como se muestra en la figura 12-7.

Entre los resultados interesantes que se pueden obtener de un análisis de los espectros y estados vibracionales, está la abundancia relativa de isótopos nucleares. La frecuencia de

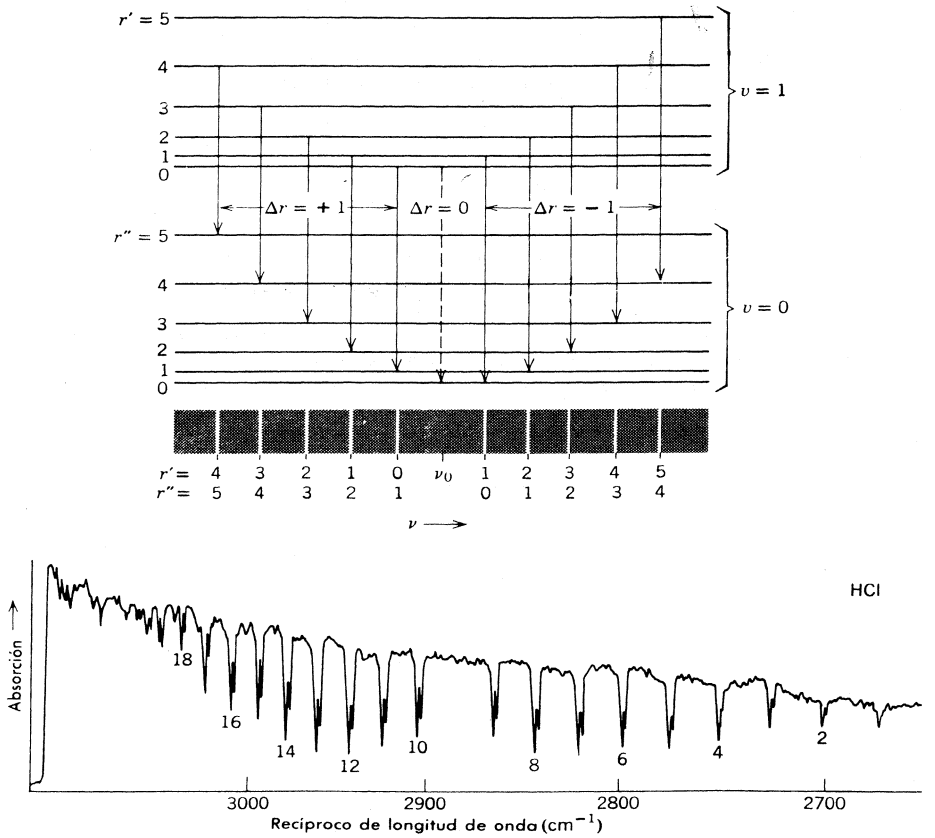


FIGURA 12-7

Arriba: Diagrama de niveles de energía para estados vibracionales y rotacionales de una molécula diatómica, que muestra transiciones permitidas y la formación de una banda de líneas equidistantes como se muestra en el espectro de abajo. Obsérvese que todas las transiciones con $\Delta r = 0$ producirán fotones de igual frecuencia ν_0, pero como son prohibidas, las líneas correspondientes están ausentes del espectro. *Abajo:* Traza en una graficadora del espectro vibro-rotacional de absorción de HCl. Obsérvese, una vez más, que la transición central está ausente. Las frecuencias ligeramente diferentes en cada línea de absorción se deben a la presencia de dos isótopos del cloro.

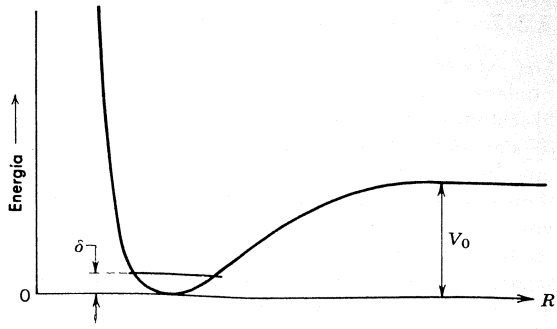


FIGURA 12-8
La energía para H_2, HD, y D_2, es la misma función de la separación internuclear R. Sin embargo, la energía del estado base vibracional, δ, es diferente para cada molécula.

vibración, $\nu_0 = (1/2\pi)\sqrt{C/\mu}$, depende de las masas de los átomos en la molécula a través de la masa reducida μ. Si por ejemplo, en una muestra de moléculas de HCl se encuentran presentes los isótopos Cl^{35} y Cl^{37}, entonces las frecuencias vibracionales y los niveles de energía resultantes serán ligeramente diferentes para los dos tipos de molécula (ver la figura 12-7). En consecuencia, sus líneas espectrales estarán corridas, unas con respecto a las otras, y midiendo intensidades espectrales se puede obtener la abundancia relativa de los isótopos Cl^{35} y Cl^{37}.

De un modo un poco relacionado se obtiene evidencia experimental para la energía finita del punto-cero de un oscilador. Considérese las moléculas H_2, HD, y D_2 en donde D denota un átomo de deuterio. Para todos los casos se obtiene la misma curva de energía potencial $V(R)$, porque las fuerzas eléctricas son iguales en esos casos, como se muestra en la figura 12-8. La energía necesaria para disociar la molécula es $E_d = V_0 - \delta$. Si la energía del estado base, δ, fuera cero, entonces las energías de disociación serían iguales, $E_d = V_0$, para cada tipo de molécula. La teoría cuántica da una energía de punto-cero finita, a saber, $\delta = (1/2)h\nu_0$. Sin embargo, δ tiene un valor diferente para cada tipo de molécula, ya que la masa reducida μ interviene en la fórmula para ν_0, de modo que las energías de disociación difieren. De hecho, si

$$\mu_{\mathrm{D}} = 2\mu_{\mathrm{H}_2} \qquad \text{y} \qquad \mu_{\mathrm{HD}} = (4/3)\mu_{\mathrm{H}_2}$$

se pueden predecir la diferencia y encontrar que las energías de disociación observadas difieren exactamente en lo predicho, verificando así la existencia de una energía de punto-cero, de acuerdo con los requisitos del principio de incertidumbre.

En la tabla 12-1 se presenta una lista de las constantes rotacionales y vibracionales de algunas moléculas diatómicas.

TABLA 12-1. Constantes vibracionales y rotacionales de algunas moléculas diatómicas.

Moléculas	R_0(Å)	ν_0 (cm^{-1})	$\frac{\hbar^2}{2I}$ (eV)	Moléculas	R_0(Å)	ν_0 (cm^{-1})	$\frac{\hbar^2}{2I}$ (eV)
H_2	0.74	4395	7.56×10^{-3}	LiH	1.60	1406	9.27×10^{-4}
HD	0.74	3817	5.69×10^{-3}	HCl^{35}	1.27	2990	1.32×10^{-3}
D_2	0.74	3118	3.79×10^{-3}	$NaCl^{35}$	2.51	380	2.36×10^{-5}
Li_2	2.67	351	8.39×10^{-5}	KCl^{35}	2.79	280	1.43×10^{-5}
N_2	1.09	2360	2.48×10^{-4}	KBr^{79}	2.94	231	9.1×10^{-6}
O_2	1.21	1580	1.78×10^{-4}	HBr^{79}	1.41	2650	1.06×10^{-3}

12.7 Espectros electrónicos

Los estados rotacionales y vibracionales en las moléculas son debidos al movimiento de los núcleos. Desde luego que también puede haber estados excitados electrónicos. Para cada uno de los estados electrónicos, correspondientes a configuraciones electrónicas diferentes, existe una dependencia diferente entre la energía de la molécula y la separación entre sus núcleos. Dado que los átomos se encuentran menos ligados en los estados excitados, las curvas que representan la energía potencial de la molécula como función de la separación internuclear, se vuelven menos profundas y más anchas y la distancia de separación en equilibrio R_0 aumenta, conforme la excitación electrónica aumenta, tal como se muestra en la figura 12-9. La separación en energía entre diferentes estados electrónicos, se encuentra entre 1 y 10 eV, así que las transiciones entre dichos estados electrónicos producen radiación en la región visible o ultravioleta del espectro electromagnético.

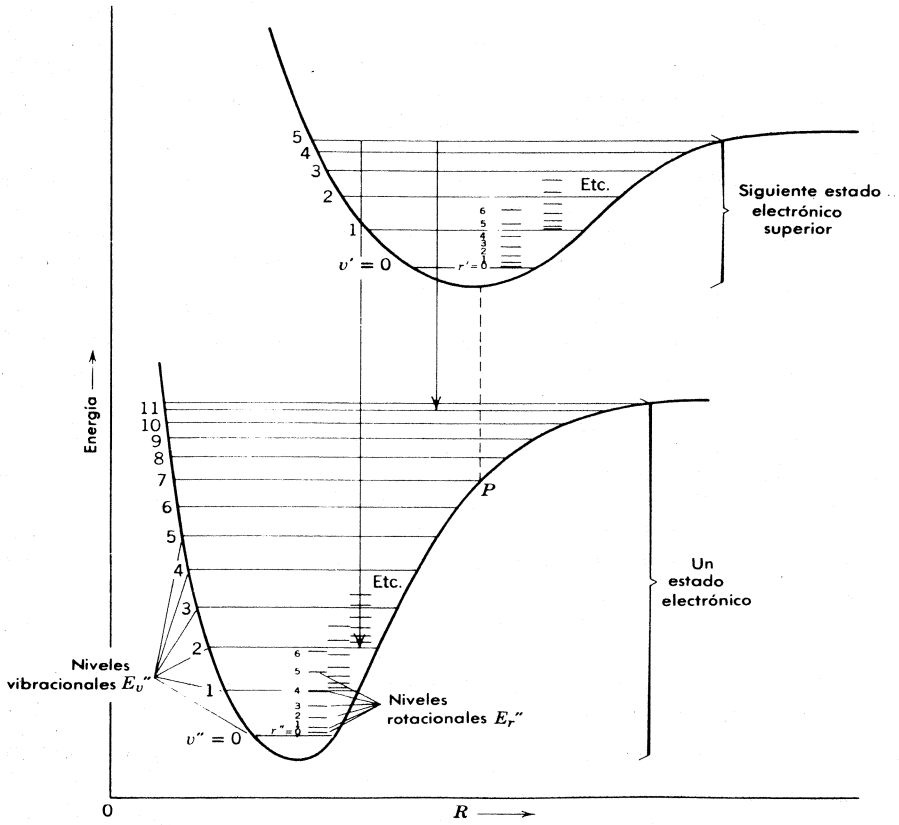


FIGURA 12-9
Ilustración de la energía molecular como función de la separación internuclear para dos estados electrónicos. Cada estado electrónico posee su propio conjunto de niveles vibracionales, y cada nivel vibracional posee su propio conjunto de niveles rotacionales.

Para cada estado electrónico E_e existen muchos estados ligados vibracionales de energía E_v, y para cada estado vibracional existen muchos estados ligados rotacionales de energía E_r. Despreciando interacciones entre estos modos, la energía total se puede escribir como $E = E_e + E_v + E_r$. En una transición electrónica las energías de los tres modos pueden cambiar, así que en general se escribe

$$\Delta E = \Delta E_e + (E'_v - E''_v) + (E'_r - E''_r) \tag{12-5}$$

Los estados inicial (con primas) y final (con dobles primas) vibracionales y rotacionales, difieren en su enlace, de modo que cambian el espaciamiento en equilibrio, la inercia rotacional y la frecuencia de vibración fundamental. Son muchas las transiciones que son posibles y producen un espectro de líneas muy complejo que, como se muestra en la figura 12-10, aparece como una serie de bandas. De allí que se utilice el término *espectros de bandas*.

El término ΔE_e es la diferencia de energías entre los mínimos de los dos estados electrónicos. El término vibracional es $E'_v - E''_v = (v' + 1/2)hv'_0 - (v'' + 1/2)\,hv''_0$ y el término rotacional es $E'_r - E''_r = (\hbar^2/2I')r'(r' + 1) - (\hbar^2/2I'')r''(r'' + 1)$. Para una transición electrónica dada, el espectro consiste de bandas, donde cada banda corresponde a un valor dado de v' y v'' y todos los valores posibles de r' y r''. Las reglas de selección determinan las combinaciones posibles de valores de v', v'', y r', r''. En este caso, la regla de selección rotacional para radiación del dipolo eléctrico es $\Delta r = 0, \pm 1$ En este caso, la regla es más amplia que para rotaciones puras ya que se permite $\Delta r = 0$]. La razón está en que el cambio de configuración electrónica que acompaña al cambio rotacional, elimina las consideraciones de paridad que anteriormente excluyeron $\Delta r = 0$ (ver la sección 8-7). La regla de selección vibracional para radiación del dipolo eléctrico es $\Delta v = \pm 1$ para un oscilador armónico simple. Sin embargo, si el potencial se desvía del tipo armónico simple, es decir, si es inarmónico, entonces $\Delta v = 2, 3, \ldots$, etc., también son permitidos. Estas reglas vibracionales se aplican únicamente si el estado electrónico no cambia y por lo tanto se aplican a bandas de vibración-rotación puras. Si existe un cambio en el estado electrónico, entonces las reglas de selección quedan determinadas por el llamado *principio de Franck-Condon*, que enseguida se explicará.

Ya se ha visto que en una molécula existe una interacción muy pequeña entre el movimiento electrónico y el movimiento nuclear. Además, el tiempo característico para una transición electrónica es $\Delta t \simeq 10^{-16}$ seg., mientras que para una vibración nuclear, este tiempo tiene un valor mucho más grande, $\Delta t \simeq 10^{-13}$ seg. El efecto resultante es que la distancia internuclear permanece casi igual durante una transición electrónica y en la figura 12-9 dicha transición está apropiadamente representada por una línea recta vertical (línea de R constante). Si el estado superior corresponde a $v' = 0$, entonces la función de distribución de probabilidad para el oscilador es grande cerca de la separación de equilibrio y una transición electrónica al estado inferior deja la molécula en el punto P de la curva de potencial de esa figura. Esto corresponde a $v'' = 7$ para el estado inferior. Obsérvese que, clásicamente, los núcleos tienen energías cinéticas pequeñas en cada caso, ya que inicialmente $v' = 0$ y porque P corresponde a un extremo del movimiento vibracional para $v'' = 7$. Esto satisface el requisito de que la velocidad nuclear relativa sea la misma en ambos estados en el momento de una transición con el fin de que el movimiento nuclear pueda ajustarse rápidamente a las nuevas condiciones electrónicas. Las transiciones son mucho más favorables en estas condiciones. En mecánica cuántica se obtienen el mismo resultado ya que en el estado base de un oscilador, como en $v' = 0$, la amplitud máxima de la eigenfunción ocurre en el centro del movimiento, mientras que para los estados superiores, como en $v'' = 7$, la eigenfunción tiene amplitud máxima cerca de los extremos de la oscilación. Las intensidades serán grandes únicamente cuando las eigenfunciones de los estados superior e inferior tengan un translape espacial significativo, ya que la integral en el elemento de matriz del dipolo eléctrico, (8-42) que determina las intensidades relativas, o reglas de selección, involucra un producto de dichas eigenfunciones. En general, las transiciones más favorables son aquellas que pueden ocurrir, desde un punto de vista clásico,

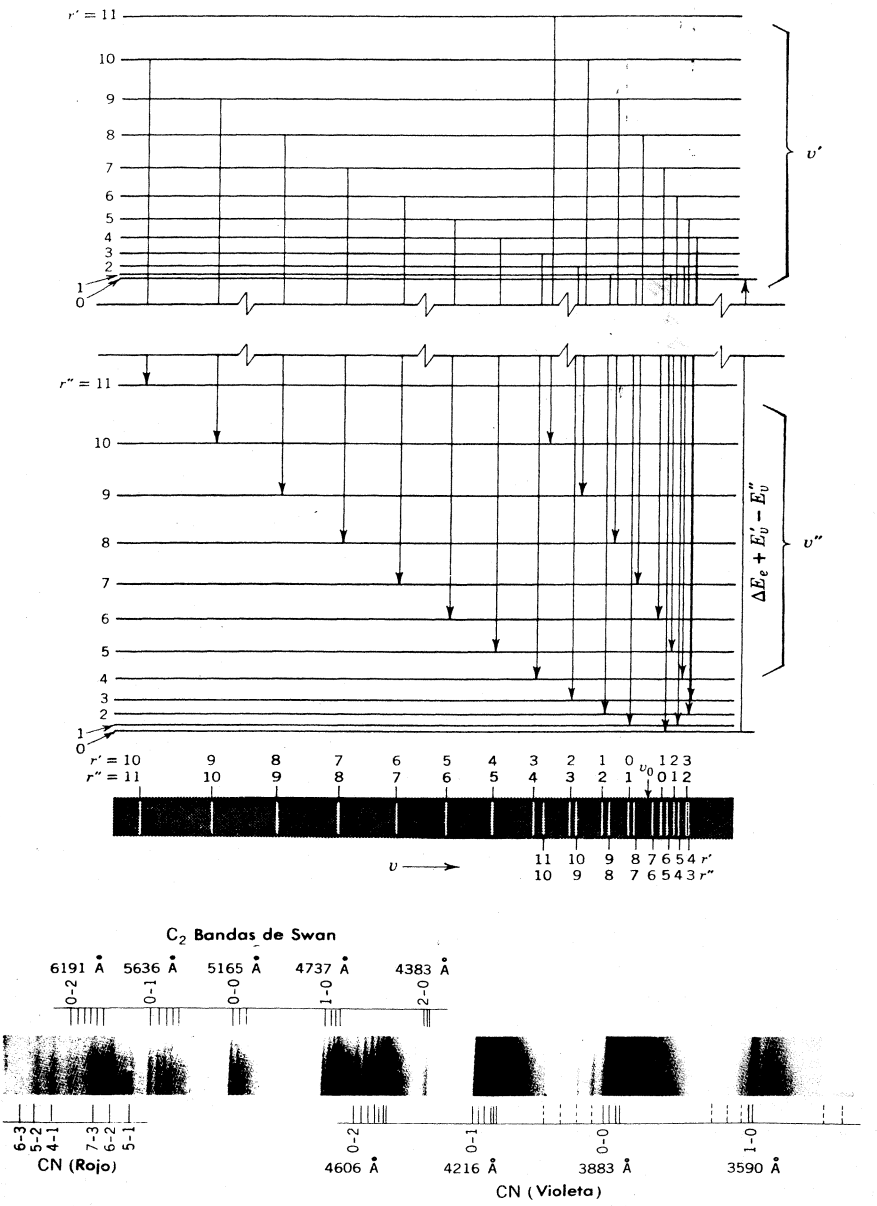


FIGURA 12-10

Arriba: Diagrama de niveles de energía y transiciones que conducen a la formación de una banda electrónica. A diferencia con la fig. 12-7, el espectro de bandas indicado se desdobla sobre sí mismo, dando lugar a una cabecera de la banda en el extremo derecho del espectro. Una vez más obsérvese que la transición de frecuencia ν_0 está ausente. *Abajo:* Bandas de las moléculas de CN y C_2 en un arco de carbón en aire. (Tomado de *Spectra of Diatomic Molecules* de Herzberg, 1950, D. Van Nostrand Co., Inc., Nueva York)

para distancias internucleares iguales en ambos estados inicial y final y con los núcleos en los extremos de su oscilación. En la figura 12-9, los ejemplos se muestran con líneas verticales desde $v' = 5$ a $v'' = 2$ o $v'' = 11$. Estas reglas las dedujo Franck de consideraciones clásicas y Condon las afirmó en bases mecanicocuánticas.

Si el estado excitado no está ligado, la molécula se disocia. El espectro correspondiente produce una banda continua, porque tales estados no ligados poseen un continuo de energías posibles. De esta manera, la aparición de un continuo en el espectro de absorción de una molécula, constituye una evidencia experimental de disociación fotoquímica.

12.8 El efecto Raman

En 1928, Raman descubrió experimentalmente un efecto interesante que proporciona mucha información acerca de los estados cuánticos moleculares. Este efecto consiste en el cambio de frecuencia de la luz dispersada por moléculas. El estudiante puede estar familiarizado con otros procesos de dispersión de luz. En la dispersión de Rayleigh ordinaria, por moléculas, la frecuencia dispersada es igual a la frecuencia incidente. En el proceso de fluorescencia, la frecuencia de la luz incidente coincide con una frecuencia de absorción de las moléculas dispersoras del gas; éste es un proceso de resonancia por medio del cual la molécula se eleva a un estado excitado y, después de permanecer allí un período muy corto, vuelve a emitir luz a una frecuencia diferente. En el efecto Raman, la frecuencia dispersada es diferente de la frecuencia incidente y la frecuencia incidente *no* está relacionada con la frecuencia característica de la molécula dispersora; Si la radiación incidente es intensa y monocromática de frecuencia ν, se encuentra que la luz dispersada a 90° con respecto a la dirección de incidencia, contiene no sólo radiación de frecuencia ν (dispersión de Rayleight). sino también radiación de frecuencia $\nu \pm \nu'$ (dispersión de Raman). Por lo tanto, el espectro dispersado contiene líneas de Raman débiles a ambos lados de la línea Rayleigh. Si se cambia la frecuencia incidente, una vez más se encuentran líneas débiles a ambos lados de la línea de Rayleigh en el espectro de luz dispersada, con la misma diferencia en frecuencia que anteriormente. En el efecto Raman, la *diferencia* de frecuencia ν' entre la luz incidente y dipersada, en característica de transiciones en la molécula dispersora. Durante el proceso de dispersión, la molécula puede cambiar su estado, de una energía permitida a otra. Con el fin de que se conserve la energía en el proceso, el fotón dispersado deberá tener una energía diferente a la del fotón incidente, por una cantidad igual pero de signo opuesto al cambio en energía de la molécula.

Considérese una molécula dispersora en un estado rotacional r. En el espectro rotacional ordinario se encontrarán líneas que corresponden a las transiciones con $\Delta r = \pm 1$. Sin embargo, en el espectro de dispersión de Raman, se encuentran corrimientos de frecuencia, respecto a la frecuencia incidente, que corresponden a transiciones rotacionales en la molécula dispersora, con $\Delta r = \pm 2$. Por lo tanto, las transiciones prohibidas en el espectro ordinario de emisión y absorción, son permitidas en el proceso Raman. Un análisis mecánico-cuántico del proceso Raman conduce a la conclusión de que una transición Raman entre los estados α y β sólo puede ocurrir, si existe un estado γ tal que las transiciones ordinarias entre α y γ y entre β y γ son permitidas. Es como si se fuera de α a β a través de γ. En este caso, si α tiene un número cuántico r, entonces el de γ es $r \pm 1$. Una transición ordinaria de γ a β, sin embargo, requiere de otro cambio $\Delta r = \pm 1$, de modo que el cambio total en r al ir de α a β es $\Delta r = 0, \pm 2$. La regla de selección $\Delta r = 0$ produce dispersión de Rayleigh y la regla de selección $\Delta r = \pm 2$ produce dispersión de Raman. Por lo tanto, en el espectro de dispersión se encuentran líneas a ambos lados de la línea incidente que se encuentran espaciadas aproximadamente al doble, en frecuencia, que las líneas del espectro rotacional ordinario. Lo anterior se muestra esquemáticamente en la figura 12-11.

Existe también efecto Raman con estados vibracionales. Una molécula, en el proceso de dispersar un fotón de frecuencia ν, puede cambiar su estado vibracional. Dado que $\Delta v = \pm 1$, el nivel vibracional final de la molécula podrá ser el inmediato superior o el inmediato inferior del nivel inicial. Por lo tanto, la frecuencia de dispersión de Raman será $\nu \pm \nu'$, donde el cambio de frecuencia ν' es una frecuencia vibracional característica de la molécula. Sin embargo, a temperaturas ordinarias, la mayoría de las moléculas se encuentran en su estado base vibracional, $v = 0$, de modo que la molécula absorbe energía y pasa al estado $v = 1$. De esta manera, en el espectro Raman sólo aparece la línea de frecuencia menor $\nu - \nu'$. Sin embargo, si el nivel $v = 1$ se encuentra suficientemente poblado, para que ocurran el

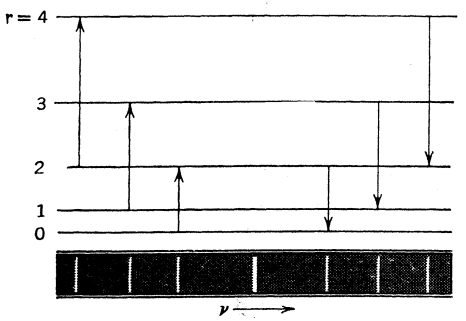


FIGURA 12-11
Diagrama esquemático que muestra el origen de las líneas rotacionales de Raman a ambos lados de la línea de dispersión de Rayleigh.

número suficiente de transiciones entre $v = 1$ y $v = 0$ para que la intensidad sea detectable, entonces se observará la línea de frecuencia mayor $\nu + \nu'$ Lo anterior ocurre con mayor probabilidad entre menor sea la energía del estado $v = 1$ y entre mayor sea la temperatura del gas dispersor.

Como ejemplo de la utilidad de la dispersión de Raman, considérense dos moléculas con núcleos idénticos, como O_2 y N_2. Puesto que estas moléculas no poseen un momento dipolar eléctrico, no se pueden observar directamente espectros rotacionales o vibracionales. Sin embargo, mediante dispersión de Raman, si se puede obtener un espectro vibrorrotacional de esas moléculas. Es como si la radiación incidente polarizara la molécula y de ese modo indujera un momento dipolar eléctrico; ésto permite la emisión y absorción de radiación correspondiente a los movimientos de rotación y vibración de la molécula. Desde luego que en una transición electrónica del O_2 o del N_2 la estructura fina del espectro revela la estructura rotacional y vibracional, pero tal espectro se encuentra en el ultravioleta y la estructura fina es muy difícil de resolver. Históricamente, Rasetti, utilizando el espectro de Raman, fue el primero en determinar la inercia rotacional, o momento de inercia, de la molécula de N_2.

12.9 Determinación del spin nuclear y carácter de la simetría

Se han ignorado las interacciones más débiles que intervienen en la estructura detallada de los espectros moleculares, tales como el efecto del spin nuclear en los estados de energía de una molécula. Sin embargo, no se puede ignorar un efecto muy importante del spin nuclear sobre el espectro de una molécula, aún cuando la interacción del spin en sí sea despreciable. En una molécula diatómica con núcleos *idénticos*, los estados que pueden ser ocupados y las transiciones que son permitidas están restringidas por requisitos de simetría. Si los spin nucleares son enteros (0, 1, 2,....), entonces, la eigenfunción completa de la molécula debe ser simétrica respecto de un intercambio de marcas de los dos núcleos (bosones) idénticos. Si los spin nucleares son semienteros (1/2, 3/2,....), entonces, las eigenfunciones deberán ser antisimétricas ante un intercambio de marcas de los dos núcleos, ya que éstos serán fermiones idénticos.

Si se descartan las pequeñas interacciones entre los modos asociados con el comportamiento: electrónico, vibracional, rotacional y del spin nuclear, de la molécula, la eigenfunción molecular se puede escribir como el producto de cuatro factores. El factor electrónico no involucra las etiquetas nucleares, mientras que los otros tres si lo hacen, y el factor ψ_v, para vibraciones del espaciamiento internuclear, es en todos los casos simétrica con respecto a un intercambio de marcas nucleares como puede verse inmediatamente del hecho de que puede escribirse como

$$\psi_v = \psi_v(|x_1 - x_2|)$$

donde x_1 y x_2 son las coordenadas de los núcleos marcados con 1 y 2, medidas a lo largo de la línea que une sus centros. Es decir, la variable independiente en la eigenfunción vibracional es la *magnitud* de la distancia entre los dos núcleos idénticos. Como esta distancia no cambia

cuando las marcas nucleares se intercambian, ψ_v , en sí no cambia y por lo tanto es simétrica respecto al intercambio. Por lo tanto, la simetría de la eigenfunción molecular está gobernada por la simetría del producto de su factor rotacional y de su factor de spin nuclear.

Si se escoge adecuadamente el origen de coordenadas en el centro de la molécula (es decir, en el centro de masas, a la mitad de la distancia entre los núcleos); la pregunta respecto a qué pasa con el signo del factor rotacional ψ_r , cuando se intercambian las marcas nucleares, está íntimamente relacionada con la pregunta de qué pasa con el signo cuando se cambian los signos de todas las coordenadas. Si el origen se escoge de la forma señalada, la operación que cuestiona la paridad en (8-44) ($x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$) alcanza, obviamente, lo mismo que la operación que cuestiona la simetría ($1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$), y la simetría de ψ_r se vuelve lo mismo que su paridad. Además, inmediatamente se puede aplicar la interpretación de (8-47) para determinar la paridad de ψ_r , si se intercambia el número cuántico del impulso angular orbital, l, que allá se utiliza, por el número cuántico rotacional, r, que aquí se utiliza, concluyendo que la paridad de ψ_r es par, si r es par y la paridad de ψ_r es impar, si r es impar. La justificación se encuentra en que si el impulso angular rotacional de la molécula *está* cuantizado, entonces no podrán haber impulsos rotativos externos que actúen sobre élla, por lo tanto, la función de energía potencial que describa el medio externo (si lo hay) en el que se realiza la rotación de la molécula, deberá ser esféricamente simétrica respecto al origen de coordenadas escogido; éste es el único requisito para la validez de (8-47). Resumiendo, se tiene que la eigenfunción rotacional ψ_r es simétrica si r es par y antisimétrica si r es impar.

Considérese ahora la situación en que el *número cuántico i, del impulso angular del spin nuclear,* posee uno de los valores $i = 1/2, 3/2, 5/2, \ldots$ Entonces, la eigenfunción molecular completa deberá ser antisimétrica ante un intercambio de marcas nucleares. Existen dos modos en los que puede suceder esto: (1) o bién, la eigenfunción del spin nuclear es antisimétrica y la eigenfunción rotacional es simétrica, o (2) la eigenfunción del spin nuclear es simétrica y la eigenfunción rotacional es antisimétrica. Ambas posibilidades pueden ocurrir, pero no en la misma molécula. Las razones son: (1) la simetría del factor de spin nuclear de la eigenfunción, está determinada por la orientación relativa de los dos spin nucleares (por ejemplo, para $i = 1/2$, el caso simétrico corresponde a cuando los dos spin se encuentran esencialmente paralelos, mientras que el caso antisimétrico será cuando se encuentren esencialmente antiparalelos, exactamente igual que para dos electrones con número cuántico de spin $s = 1/2$), y (2) la interacción entre los spin nucleares es muy pequeña, de modo que si los spin tienen una orientación relativa particular, la mantendrán durante mucho tiempo (del orden de años).

Prácticamente, es como si hubiera dos especies distintas de moléculas. A la especie con *eigenfunciones simétricas de spin nuclear* se le denomina *orto,* y a la especie con *eigenfunciones antisimétricas de spin nuclear* se le denomina *para,* como por ejemplo, ortohidrógeno y parahidrógeno. La misma terminología se utiliza del mismo modo, ya sea i semientero o entero. Sin embargo, si i es semientero, la especie orto sólo posee eigenfunciones rotacionales antisimétricas, mientras que la especie para, sólo eigenfunciones rotacionales simétricas, como se ha estado considerando; mientras que si i es entero, la simetría de la eigenfunción molecular completa cambia de modo que la especie orto sólo tiene eigenfunciones rotacionales simétricas y la especie para sólo tiene eigenfunciones rotacionales antisimétricas. Estas relaciones se encuentran resumidas en los diagramas de niveles de energía rotacionales de la figura 12-12. El par del lado izquierdo corresponden a moléculas cuyos núcleos poseen spin semienteros. Para la especie orto de esas moléculas, sólo los estados rotacionales con r impar, pueden se poblados, ya que la eigenfunción rotacional deberá ser antisimétrica, y esto ocurre sólo para r impar. En la especie para, sólo los estados rotacionales simétricos pueden ser poblados, que son los correspondientes a r par. Las relaciones se invierten para moléculas con núcleos de spin entero, como se indica en el par de diagramas de niveles de energía que aparecen al lado derecho de la figura 12-12. Los puntos negros en la figura, señalan los niveles de energía que pueden ser poblados y las flechas señalan las transiciones que son posibles entre estos niveles.

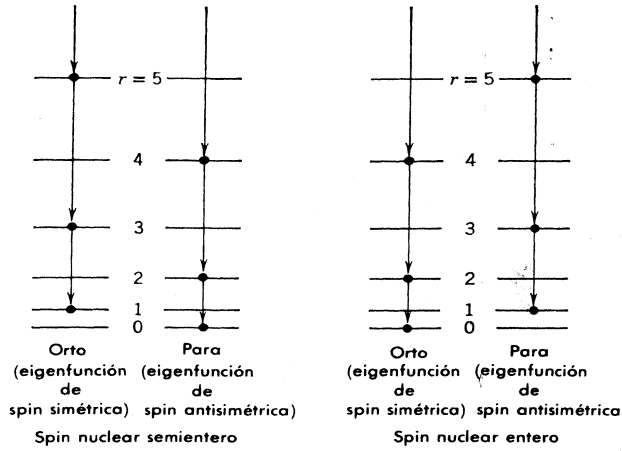


FIGURA 12-12
Ilustración que muestra la relación entre los estados rotacionales y de spin que pueden ser poblados en moléculas con núcleos idénticos de spin entero o semientero. Los puntos indican los estados posibles y las flechas indican transiciones entre estos estados.

Como las moléculas con núcleos idénticos no poseen momentos dipolares eléctricos, los espectros rotacionales emitidos en dichas transiciones no pueden ser observados directamente; sin embargo, las transiciones entre estados rotacionales pueden ser observados indirectamente en la dispersión de Raman, o en el espectro de bandas, como se explicó en secciones anteriores.

Las medidas del número de transiciones que realiza la especie para de esas moléculas, en relación con el número de transiciones realizadas por la especie orto, constituye un procedimiento utilizado muy frecuentemente para determinar el valor del número cuántico de spin i de los núcleos que forman la molécula. Estos números son proporcionales a las cantidades relativas de las especies presentes en la muestra y, a temperaturas ordinarias cuando se encuentran excitados muchos estados rotacionales, las cantidades relativas son proporcionales al número de estados de spin nuclear de las dos especies. En el ejemplo 12-6, se demostrará que la relación entre el número de estados de spin antisimétrico, $\mathcal{N}$ para, y el número de estados de spin simétrico, $\mathcal{N}$ orto, es

$$\frac{\mathcal{N}_{\text{para}}}{\mathcal{N}_{\text{orto}}} = \frac{i}{i+1} \tag{12-6}$$

El número de transiciones debe concordar con esta relación, de modo que debe obtenerse una *alternación de intensidades* en el espectro Raman rotacional del N_2, que se muestra en la figura 12-13, en la cual las intensidades de las líneas alternadas se midieron con mucha precisión y se encuentra que están en la relación 1/2. El espectro O_2 es aún más interesante, ya que en ese caso la relación es 0/1, puesto que las líneas alternas simplemente no se encuentran. Ese espectro no se ha mostrado porque el interés no es aparente sino hasta que se realiza una comparación cuidadosa entre las frecuencias de las líneas medidas y las frecuencias predichas y se encuentra que la mitad de las líneas están ausentes.

Ejemplo 12-4. Determinar los valores del número cuántico de spin nuclear i, para los núcleos en N_2 y O_2, utilizando las relaciones de intensidades, medias, 1/2 y 0/1, en (12-6).

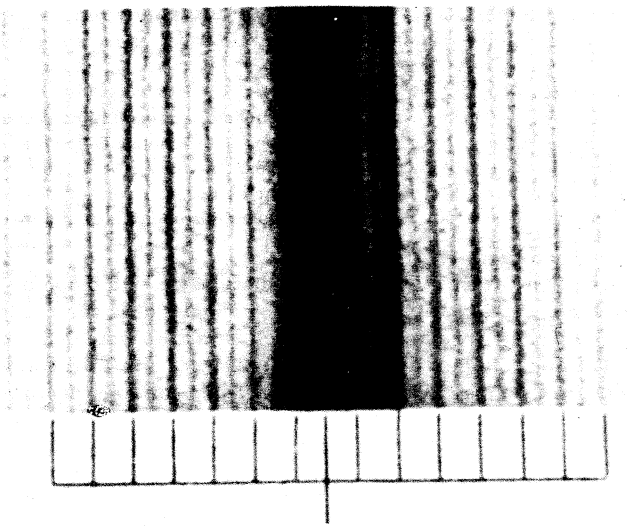


FIGURA 12-3
Intensidades alternadas en un espectro rotacional Raman de N_2, excitado por la línea de Hg de 2536.5 Å .

Como los valores posibles de i se restringen a $i = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots$, inmediatamente se puede demostrar por simple inspección que la solución de

$$\frac{1}{2} = \frac{i}{i+1}$$

es $i = 1$. Este es el spin del núcleo de N (es decir, de su isótopo N^{14} que es el más abundante).

Para

$$\frac{0}{1} = \frac{i}{i+1}$$

la solución es obviamente $i = 0$. Este es el spin del átomo de O (realmente de su isótopo más abundante O^{16}, ya que los otros isótopos, O^{17} y O^{18}, son tan raros que el abundante domina el espectro). ◀

La razón para la ausencia completa de la mitad de las transiciones que involucran niveles rotacionales de moléculas con dos núcleos idénticos de $i = 0$, es simplemente que cuando $i = 0$ esto significa que los núcleos son bosones que no tienen spin, de modo que la eigenfunción molecular es necesariamente simétrica y no posee un factor de spin en ella. Por lo tanto, su factor rotacional debe ser siempre simétrico, lo que requiere que la molécula se encuentre solamente en niveles rotacionales con r par. La prueba de que estas consideraciones de simetría son reales, se encuentra en el hecho de que cuando en O_2, los núcleos no son idénticos (por ejemplo, $O^{16} - O^{17}$, o $O^{16} - O^{18}$) entonces, la mitad de las transiciones *no* están ausentes. En realidad, este hecho experimental fue el que condujo al descubrimiento de los isótopos O^{17} y O^{18}.

Como ya se mencionó, el procedimiento del ejemplo 12-4 ha sido ampliamente aplicado. Fue utilizado en la primera determinación del spin del protón, $i = 1/2$, a partir de la relación 1/3 de intensidades medidas en el espectro de H_2. Las medidas son difíciles de realizar solamente cuando i es muy grande.

La determinación del carácter de simetría de los núcleos idénticos en moléculas como N_2 se reduce al problema de mantener la pista de *cuales* líneas del espectro son las más intensas.

Ejemplo 12-5. En el N_2 se observa que aquellas transiciones que implican estados rotacionales con r par, producen líneas más intensas. Determinar el carácter de la simetría de los núcleos en esa molécula.

Dado que (12-6) demuestra que los estados de spin nuclear simétricos (orto), son los correspondientes a la población más alta, y como también los estados rotacionales de r par son simétricos, entonces, los estados de spin nuclear simétrico están asociados con estados rotacionales simétricos. Por lo tanto, el núcleo de N^{14}debe ser un bosón. ◀

Las determinaciones del carácter de simetría realizadas de este modo en cierto número de núcleos, han contribuido a algunas de las primeras evidencias de la correlación existente entre el carácter de simetría y el spin, como se muestra en la tabla 9-1. Además, en el capítulo 15 se verá cómo el hecho de que el núcleo de N^{14},en particular,sea un bosón con $i = 1$, fue utilizado en los primeros años para demostrar que los núcleos deben contener protones y neutrones, en lugar de protones y electrones.

Ejemplo 12-6. Demostrar que la relación entre el número de estados de spin antisimétricos y el número de estados de spin simétricos es $i/(i + 1)$, que concuerda con (12-6).

El número de estados de spin individuales posibles para una partícula con número cuántico de spin i dado, es igual al número de valores posibles del número cuántico de la componente z, m_i. Como usualmente sucede, los valores de m_i difieren entre sí por números enteros y van desde $-i$ hasta i, este número será el familiar $(2i + 1)$. De esta manera, el número total de combinaciones independientes de estados de spin posibles para dos partículas idénticas de spin i es $(2i + 1)\ (2i + 1) = (2i + 1)^2$. En $(2i + 1)$ de estos estados, ambas partículas tendrán la misma m_i, así que se encuentran en estados de spin idénticos. Para estos estados, la eigenfunción del sistema de dos partículas es simétrica con respecto al intercambio de marcas de las partículas (como los miembros de la parte más superior y más inferior de (9-18), en el caso de $i = 1/2$). De los $(2i + 1)^2 - (2i + 1) = 2i(2i + 1)$ estados restantes, ante este intercambio la mitad serán simétricos y la mitad antisimétricos, ya que una mitad implica suma de productos de eigenfunciones de spin individuales y la otra mitad implica diferencias de productos (como los miembros de la parte central de (9-18) y (9-17) en el caso de $i = 1/2$). Por lo tanto, el número total de eigenfunciones simétricas es

$$\mathcal{N}_{\text{simétricas}} = \mathcal{N}_{\text{orto}} = (2i + 1) + (1/2)2i(2i + 1) = (i + 1)(2i + 1)$$

y el número total de eigenfunciones antisimétricas es

$$\mathcal{N}_{\text{antisimétricas}} = \mathcal{N}_{\text{para}} = (1/2)2i(2i + 1) = i(2i + 1)$$

La relación del número de eigenfunciones, o estados de spin, es

$$\frac{\mathcal{N}_{\text{para}}}{\mathcal{N}_{\text{orto}}} = \frac{i}{i + 1}$$

en concordancia con (12-6). ◀

PREGUNTAS

1. Analizar la afirmación de que la ley para la fuerza interatómica debe ser atractiva para permitir fases condensadas y debe ser repulsiva para evitar que el volumen sea cero.

2. ¿Podría esperarse que existiera H_3 en un estado ligado? ¿ He_2 ?. Explicar.

3. ¿Cuál de los llamados gases inertes formaría una molécula con otros elementos más fácilmente? Explicar.

4. ¿Cómo se puede explicar la existencia de estados ligados de XeF_4, en vista de que el átomo de Xe no posee electrones de valencia?

5. Las eigenfunciones de H_2 pares o impares, ¿tienen paridad par o impar?

6. Explicar por qué sólo dos electrones pueden formar un enlace covalente.

7. ¿Podría predecirse el enlace iónico o covalente en H_2O? ¿En NH_3? ¿En CH_4? ¿Es necesario realizar un experimento para decidir la cuestión o es posible descartar uno u otro tipo de enlace independientemente?

8. ¿Qué puede concluirse acerca del enlace y el arreglo de los átomos en la molécula de CO_2, dado que dicha molécula no posee un momento dipolar eléctrico?

9. De las moléculas H_2, D_2, y HD, ¿cuál tiene la mayor energía de enlace? ¿Cuál tiene la menor?

10. ¿Qué quiere decir que una molécula se encuentre en un estado excitado?

11. Explicar cómo es que la existencia de un punto-cero finito de la energía vibracional se relaciona con el principio de incertidumbre.

12. La energía vibracional fundamental del HCl es, aproximadamente, diez veces mayor que la correspondiente de NaCl. Hacer ésto posible considerando los factores que determinan esta cantidad.

13. ¿Qué efecto tiene sobre la energía vibracional de la molécula, si acaso, el impulso angular creciente de los estados rotacionales más altos de una molécula diatómica?

14. ¿Qué efecto tiene el cambio en la separación internuclear en una molécula diatómica, debido a su vibración, (la curva de su energía de enlace es asimétrica), sobre los niveles rotacionales de la molécula?

15. La asimetría en la curva de energía de enlace, se debe a la expansión térmica de los sólidos. ¿Cómo podría utilizarse la información que se obtiene de los espectros moleculares para determinar la forma de esta curva?

16. Explicar por qué la separación entre niveles de energía vibracionales es un poco menor en un estado electrónico excitado, que en el estado electrónico base (ver la figura 12-9). Explicar el mismo efecto pero para estados vibracionales.

17. Si las líneas rotacionales Raman, resultan de un momento dipolar eléctrico inducido, ¿cómo se puede explicar que la regla de selección sea $\Delta r = \pm 2$ en lugar de $\Delta r = \pm 1$?

18. Ya que como se sabe, se requeriría de un tiempo muy largo para que las especies orto y para de una molécula se puedan convertir de una a otra, entre sí, entonces, la interacción entre los spin nucleares de una molécula debe ser muy pequeña. ¿Por qué se espera que este sea el caso?

PROBLEMAS

1. De los siguientes datos, encontrar la energía necesaria para disociar una molécula de KCl en un átomo de K y un átomo de Cl. El primer potencial de ionización del K es 4.34 eV; la afinidad electrónica del Cl es 3.82 eV; la separación en equilibrio del KCl es 2.79 Å. (Sugerencia: demostrar que la energía potencial mutua del K^+ y Cl^- es $-(14.40/R)$ eV si la R está dada en Angstroms).

2. El primer potencial de ionización del K es 4.3 eV; el ion Br^- tiene una energía que es 3.5 eV menor que la del átomo neutral de bromo. Calcular la separación máxima de los iones de K^+ y Br^- que produce una molécula ligada de KBr.

3. Para un sistema que ejecuta un movimiento armónico simple respecto a su posición de equilibrio, la fuerza F está dada por

$$F = -\left(\frac{\partial^2 V}{\partial R^2}\right)_{R_0}(R - R_0)$$

donde V es la energía potencial y $R - R_0$ es la desviación del equilibrio. Demostrar que la vibración de punto-cero de una molécula está dada por

$$\frac{1}{2}h\nu_0 = \frac{h}{4\pi\mu^{1/2}}\left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial R^2}\right)_{R_0}\right]^{1/2}$$

4. Empíricamente, la energía potencial del NaCl se puede describir por

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + Ae^{-R/\rho}$$

donde R es la separación internuclear. La separación de equilibrio de los núcleos es 2.5 Å y la energía de disociación es de 3.6 eV. (a) Calcular A y ρ/R_0, despreciando las vibraciones del punto-cero. (b) Dibujar en una sola gráfica, V y cada uno de los términos de V. (c) Dar el significado físico de A y ρ.

5. Tomando de la tabla 12-1 la inercia rotacional del H_2, encontrar la temperatura a la cual la energía cinética de traslación promedio de una molécula de H_2, es igual a la energía entre el estado base rotacional y la energía del primer estado rotacional excitado. ¿Qué se puede concluir respecto a la ocupación de estados rotacionales excitados en una molécula de H_2 a temperatura ambiente?

6. Determinar δ, la energía del punto-cero, para NaCl, dado que frecuencia vibracional fundamental es de 1.14 vib./seg.

7. (a) Demostrar que si E_d es la energía de disociación de una molécula, la fracción de moléculas que se disocian a una temperatura T es $e^{-E_d/kT}$. (b) Se ha encontrado, (por estudios de difracción de electrones), que a medida que T aumenta, la separación internuclear aumenta. Explicar que efecto tiene ésto en la curva de energía potencial y en el resultado de la parte (a).

8. En el NaCl, la separación entre dos niveles vibracionales es, aproximadamente, 4×10^{-2}eV. Utilizando la tabla 12-1 y observando que los niveles rotacionales no se encuentran igualmente espaciados, demostrar que entre un par de niveles vibracionales, se encuentran, aproximadamente, 40 niveles rotacionales.

9. Las energías potenciales de dos moléculas diatómicas con la misma masa reducida, se muestran en la figura 12-14. De la gráfica, determinar cual de las moléculas tiene mayor (a) distancia internuclear, (b) inercia rotacional (momento de inercia), (c) separación entre niveles de energía rotacionales con la misma r y v, (d) energía de enlace, (e) energía del punto-cero (Sugerencia: ver el problema 3), (f) separación entre los niveles vibracionales más profundos.

10. (a) A 1000°K, ¿qué fracción de moléculas de HCl se encontrarán en el primer estado excitado vibracional? (Sugerencia: utilizar el factor de Boltzmann). (b) Encontrar la relación de moléculas de HCl en el primer estado excitado rotacional, respecto a las que se encuentran en el primer estado excitado vibracional, a 1000°K. (Sugerencia: recordar los factores de degeneración).

11. (a) Derivar una expresión que proporcione la relación entre la energía de transición entre el estado más bajo y el primer estado excitado vibracional, y la energía de transición entre el estado más bajo y el primer estado excitado rotacional, para una molécula diatómica. (b) ¿Cuál es esta relación para NaCl? ¿Para H_2 ? (Sugerencia: ver el ejemplo 12-3)

12. (a) Demostrar que el corrimiento relativo en frecuencia de una línea espectral, en una banda rotacional que resulta de la mezcla de dos moléculas diatómicas isotópicas, está dado por $\Delta\nu/\nu = -\Delta\mu/\mu$, donde μ es la masa reducida de la molécula. (b) ¿Cuál es esta relación para una mezcla de HCl^{35} y HCl^{37}?

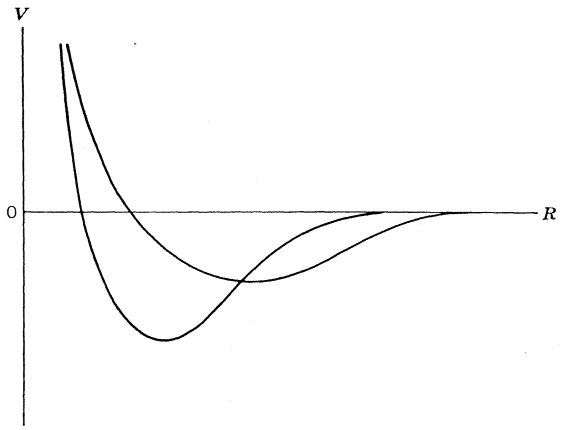


FIGURA 12-14
Curvas de energía potencial que se consideran en el problema 9.

13. Del valor para la longitud de onda recíproca equivalente a la vibración fundamental de una molécula de Cl_2, 2940.8 cm^{-1} en la cual cada uno de los átomos tiene un peso atómico de 35, determinar la longitud de onda recíproca correspondiente a Cl_2 cuando uno de sus átomos tiene peso atómico 35 y el otro 37. ¿Cuál es la separación de las líneas espectrales en longitud de onda recíproca debida a este efecto isotópico?

14. (a) Especificar la resolución $\Delta\lambda/\lambda$, de un espectrómetro que apenas pueda resolver los espectros rotacionales de $Na^{23}Cl^{35}$ y $Na^{23}Cl^{37}$ suponiendo que R_0 sea la misma para ambas moléculas. (b) ¿Podría resolver este espectrómetro, los espectros vibracionales para ambas moléculas, suponiendo que las constantes de la fuerza son iguales?

15. Calcular la diferencia en energías de disociación del H_2 y D_2, a partir del valor de la longitud de onda recíproca equivalente a la vibración fundamental de una molécula de H_2 4395.2.

16. La energía vibracional del punto-cero para H_2 es 0.265 eV. Comparar numéricamente los niveles de energía vibracional de H_2, D_2, y HD para los niveles de energía más bajos.

17. Explicar porqué el aire es transparente en el visible, a partir del hecho de que el estado electrónico excitado más bajo, en las moléculas de O_2 y N_2, se encuentran más de 3eV por encima del estado base.

18. En el espectro vibracional de Raman de HF, se encuentran líneas Raman adyacentes de longitudes de onda 2670 Å y 3430 Å. (a) ¿Cuál es la frecuencia vibracional fundamental de la molécula? (b) ¿Cuál es la constante de fuerza equivalente para HF?

19. Se utiliza un laser de rubí ($\lambda = 6943$ Å) para excitar el espectro Raman de N_2. (a) ¿Cuáles son las longitudes de onda de las líneas que resultan de las transiciones permitidas de menor energía del espectro rotacional puro de N_2? (b) ¿Cuál es la relación de intensidades de las líneas del inciso (a), a temperatura ambiente? (c) ¿Cuáles son las longitudes de onda de las líneas que resultan de las transiciones permitidas hacia y desde el estado base vibracional? (d) ¿Cuál es la relación de intensidades de las líneas del inciso (c) a la temperatura ambiente? (e) ¿Cómo cambiarían las respuestas a los incisos (a) y (c) si se utiliza en laser para excitar el espectro Raman de moléculas diatómicas con núcleos no idénticos que tienen la misma inercia rotacional y constante de fuerza que N_2?

20. El diagrama de niveles de energía rotacionales en cada uno de los dos estados vibracionales más bajos del estado base electrónico, se presenta en la figura 12-15, para una molécula diatómica. Encontrar las

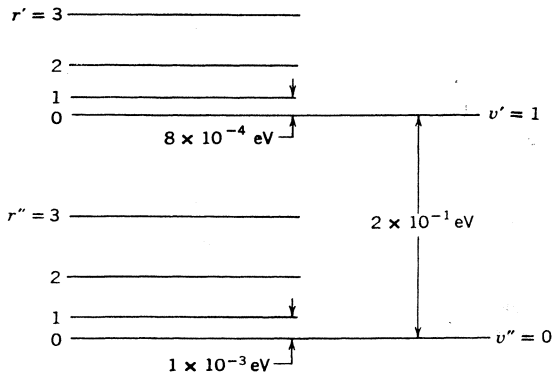


FIGURA 12-15
Niveles de energía considerados en los problemas 20, 21 y 22.

energías de las transiciones que dan lugar a las líneas espectrales permitidas en los espectros infrarrojo y Raman, (a) para moléculas que contienen dos núcleos idénticos con $i = 0$, (b) para moléculas que contienen dos núcleos idénticos con $i = 1/2$, y (c) para moléculas que contienen dos núcleos no idénticos.

21. Calcular, a la temperatura ambiente, las intensidades relativas de las líneas encontradas en los incisos (a) y (b) del problema 20.

22. Utilizando la información de la figura 12-15, (a) calcular la inercia rotacional, o momento de inercia, de la molécula en cada nivel vibracional, y (b) calcular la energía del punto-cero.

23. (a) ¿Cuántos grados de libertad rotacionales se pueden esperar en una molécula poliatómica? ¿Grados traslacionales? Si la molécula tiene N átomos $(N > 2)$ se deberán tener $3N - 6$ grados de libertad traslacionales, (es decir, modos de vibración independientes. Explicar. (b) ¿Cuántos grados de libertad vibracionales se tienen en una molécula de H_2O? ¿En una molécula de CH_4?

24. Considerar las intensidades relativas de los espectros de H_2 y D_2 para determinar que espectro Raman rotacional producirá líneas de intensidad alternada y cuya intensidad relativa es 1/2.

25. Medidas del espectro de bandas de moléculas diatómicas que contienen núcleos de Cl^{35} producen una relación de intensidades alternadas de 3/5. ¿Cuál es el spin del núcleo de Cl^{35}?

13

Sólidos - Conductores y Semiconductores

13.1 Introducción 515

Temas incluidos en la física del estado sólido.

13.2 Tipos de sólidos 515

Redes cristalinas; características cualitativas de sólidos moleculares, iónicos, covalentes y metálicos.

13.3 Teoría de bandas de los sólidos 517

Degeneración de intercambio en una red de átomos idénticos; comparación con la molécula de hidrógeno; formación de bandas de energía; bandas permitidas y prohibidas; bandas traslapadas; ocupación de las bandas; celdas unitarias; aislantes; conductores; impulsos electrónicos en aislantes y conductores; bandas de valencia y de conducción; semiconductores.

13.4 Conducción eléctrica en metales 522

Colisiones entre electrones e imperfecciones de la red; expresiones clásicas para la resistividad; conductividad y movilidad; efecto Hall; coeficiente de Hall; conducción de agujeros.

13.5 Modelo cuántico del electrón libre 524

Distribución de energía y densidad de estados del electrón libre; estimación de la energía de Fermi y número relativo de electrones de conducción para un metal; evaluación de la anchura en energía de una banda; densidad de estados para una banda en un metal bidimensional.

13.6 Movimiento de electrones en una red periódica **530**

Eigenfunciones de Bloch; modelo de Kronig-Penney; reflexión de Bragg; relación entre los resultados de Kronig-Penney y las condiciones de Bragg; simetría de las eigenfunciones y origen de los intervalos de energía prohibida de las bandas; zonas de Brillouin.

13.7 Masa efectiva **534**

Recapitulación de las propiedades de los grupos de ondas; ecuación de movimiento de un electrón en la red bajo un campo eléctrico aplicado; interpretación de la masa efectiva; masa efectiva en varias regiones de una zona de Brillouin; relación con reflexión de Bragg; comparación de las densidades de niveles por medio de la masa efectiva; uso de la masa efectiva en las expresiones clásicas para la conductividad y la resistividad; imperfecciones de la red y resistividad; masa efectiva de los agujeros.

13.8 Semiconductores **538**

Intervalos (brechas) de energía prohibida en silicio y germanio; dependencia con la temperatura de la conductividad; conductividad intrínseca y extrínseca; fotoconductividad; impurezas donantes y semiconductores tipo-n; estimación de la energía de enlace de un electrón de donante; impurezas aceptantes y semiconductores tipo-p; energía de Fermi en un semiconductor intrínseco; dependencia con la temperatura de la energía de Fermi en semiconductores con impurezas.

13.9 Dispositivos semiconductores **544**

Uniones p-n; corriente térmica; corriente de recombinación; aplicación de polarización directa o inversa; acción de rectificación; ventajas sobre rectificadores de tubos al vacío (bulbos); transistores de unión; explicación de operación en términos de uniones; acción como amplificador de potencia; diodos túnel; característica de resistencia negativa y tiempo de respuesta rápido.

Preguntas **549**

Problemas **550**

13

Sólidos-Conductores y semiconductores

13.1 Introducción

La física del estado sólido constituye una parte importante de la física cuántica cuyo interés principal es entender las propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas, magnéticas y ópticas de la materia sólida. Algunos aspectos ya han sido estudiados en capítulos anteriores, tales como las contribuciones de la red y electrónica al calor específico de los sólidos, radiación de un cuerpo negro, emisión termiónica, y potenciales de contacto. En esta parte, se hará énfasis en el origen de las fuerzas que mantienen unidos a los átomos de un sólido y en los niveles de energía permitidos para los electrones en el sólido, lo que conducirá a la teoría de bandas de los sólidos. Esta teoría se aplicará después a fenómenos de mucho interés tanto práctico como teórico, incluyendo semiconductores y dispositivos semiconductores. De esta manera, muchas de las propiedades térmicas, ópticas y eléctricas de los sólidos, serán más claramente entendidas. En el capítulo siguiente, la teoría se extenderá al fenómeno de la superconductividad y, asimismo, se considerarán las propiedades magnéticas de los sólidos.

13.2 Tipos de sólidos

En el estado gaseoso, la distancia promedio entre las moléculas es muy grande comparada con el tamaño de la molécula, de modo que éstas se pueden considerar como que están aisladas entre sí. Sin embargo, muchas sustancias se encuentran en el estado sólido a temperaturas y presiones ordinarias. En ese estado, las moléculas (o átomos) ya no pueden ser consideradas aisladas. Su separación es comparable con el tamaño molecular, y la intensidad de las fuerzas que las mantiene unidas es del mismo orden de magnitud que las fuerzas que ligan a los átomos para formar moléculas. Por lo tanto, las propiedades de una molécula se alteran por la presencia de moléculas vecinas. Una característica de los sólidos cristalinos, es el arreglo regular de los átomos, patrón periódico recurrente llamado *red cristalina*. El sólido se puede considerar como una molécula grande, donde las fuerzas entre los átomos se deben a las interacciones de los electrones atómicos y donde la estructura del sólido está determinada por el arreglo de núcleos y electrones que resulta en un sistema estable desde el punto de vista de la mecánica cuántica. A pesar de que el número de átomos involucrado es muy grande, se encuentran arreglados en un patrón regular. En sólidos no cristalinos, tales como concreto y plástico, el patrón regular perfecto no se mantiene en distancias grandes, pero se tiene un patrón ordenado en la vecindad de cualquier átomo. En este libro, solo se analizarán sólidos cristalinos. Estos sólidos se clasifican de acuerdo con el tipo de enlace predominante siendo los tipos principales: *molecular, iónico, covalente* y *metálico.*

Los *sólidos moleculares* consisten de moléculas que son tan estables que mantienen mucha de su individualidad cuando son colocadas muy cerca una de otra. Los electrones en la molécula se encuentran todos apareados, de modo que los átomos en moléculas diferentes no pueden formar enlaces covalentes entre sí. La fuerza de enlace es la débil atracción de van der Waals que se encuentra presente entre dichas moléculas en la fase gaseosa. El mecanismo físico implicado en la atracción de van der Waals, es una interacción entre dipolos eléctricos. Todas las moléculas poseen un momento dipolar eléctrico fluctuante debido al comportamiento mecánico-cuántico fluctuante de los electrones en una molécula, aunque para muchas de ellas por consideraciones de simetría, se requiere que la fluctuación ocurra en torno a un valor promedio igual a cero. Al tiempo que una molécula posea un momento dipolar eléctrico instantáneo determinado, el campo eléctrico externo que produce inducirá un momento dipolar en la distribución de carga de una molécula vecina. El estudiante podrá convencerse inmediatamente de que la fuerza entre el dipolo eléctrico inducido y el inductor siempre es atractiva dibujando diagramas rudimentarios de las cargas y el campo en los diferentes casos. La energía de interacción es proporcional al promedio del cuadrado del momento dipolar eléctrico inductor. La atracción resultante es débil, ya que las energías de enlace son del orden de 10^{-2} eV y la fuerza varía con el inverso de la séptima potencia de la separación intermolecular. En un sólido, moléculas sucesivas poseen momentos dipolares eléctricos que se alternan en orientación con el fin de producir atracciones sucesivas. Muchos compuestos orgánicos, gases inertes y gases ordinarios como el oxígeno, nitrógeno e hidrógeno forman solidos moleculares en el estado sólido. Dado que el enlace es débil, la solidificación se lleva a cabo a muy bajas temperaturas, donde los efectos perturbativos de la agitación térmica son muy pequeños. (Por ejemplo, el punto de fusión del hidrógeno sólido es 14°K). El enlace débil hace que los sólidos moleculares sean fáciles de deformar y comprimir y la carencia de electrones libres los hace malos conductores de calor o electricidad.

Sólidos iónicos, tales como el cloruro de sodio, consisten en un arreglo regular tridimensional de iones positivos y negativos alternados que tienen una energía menor que la de los iones separados. La estructura es estable, porque la energía de enlace debida a la atracción electrostática neta excede a la energía gastada en transferir electrones para crear iones aislados a partir de átomos neutros, del mismo modo que el enlace iónico en moléculas. El enlace iónico en sólidos no es direccional, ya que los iones implicados poseen capas cerradas esféricamente simétricas. Por lo tanto, los iones están arreglados como esferas en un empaquetamiento compacto. La simetría real del cristal depende de qué arreglo minimice la energía y ésto a su vez depende de los tamaños relativos de los iones implicados. Dado que no existen electrones libres que puedan portar energía o carga, estos materiales son malos conductores de calor o electricidad. Los sólidos iónicos por lo general duros, debido a que las fuerzas electrostáticas entre los iones son grandes, asimismo, poseen puntos de fusión altos. Se pueden excitar vibraciones de la red con energías que corresponden a radiación en el infrarrojo lejano, de modo que los sólidos iónicos muestran propiedades de absorción óptica muy fuertes en esa región. Sin embargo, la excitación electrónica por absorción óptica requiere de energías en el ultravioleta, de modo que los cristales iónicos son transparentes a radiación en el visible.

Sólidos covalentes son aquellos que contienen átomos que están ligados por electrones de valencia compartidos, como en el enlace covalente de las moléculas. Los enlaces son direccionales y determinan el arreglo geométrico de los átomos en la estructura del cristal. La rigidez de su estructura electrónica, hace que los sólidos covalentes sean duros y difíciles de deformar y ocasiona sus altos puntos de fusión. Dado que no existen electrones libres, los sólidos covalentes son malos conductores de calor o electricidad. En algunos casos, como en el silicio y germanio, son semiconductores. Algunos sólidos covalentes, como el diamante, son transparentes a temperatura ambiente; la energía requerida para excitar sus estados electrónicos, excede la de los fotones en la región visible del espectro de modo que dichos fotones no son absorbidos. Sin embargo, la mayoría de los sólidos covalentes absorben en el visible y por lo tanto son opacos.

Sólidos metálicos son aquellos que exhiben un enlace que puede ser considerado como un caso límite del enlace covalente, en la que todos los iones del cristal comparten electrones. Cuando un cristal se forma con átomos que tienen electrones débilmente ligados en las últimas capas, esos electrones pueden liberarse de los átomos individuales por la energía disponible al formarse el enlace. Estos electrones se mueven en el potencial combinado de todos los iones positivos y son compartidos por todos los átomos del cristal. Se habla de un gas de electrones que ocupa los espacios entre los iones positivos y que ejerce fuerzas atractivas sobre cada ión, las cuales exceden las fuerzas repulsivas de los otros iones, de ahí que resulte el enlace. Los átomos tienen espacios vacíos en sus capas electrónicas más externas, y no existen suficientes electrones de valencia por átomo para formar enlaces covalentes fuertes. Los electrones son compartidos por todos los átomos y se encuentran libres para viajar por todo el cristal de átomo en átomo, ya que existen muchos estados electrónicos desocupados. En este sentido se comportan como un gas, un "gas de electrones". Un sólido metálico es una red regular de iones positivos esféricamente simétricos, arreglados en forma de esferas compactas, a través de las cuales se mueven los electrones. Los sólidos metálicos son obviamente excelentes conductores de electricidad o calor, ya que los electrones pueden absorber fácilmente energía de radiación incidente, o de las vibraciones de la red y moverse bajo la influencia de un campo eléctrico aplicado o un gradiente térmico. Dichos sólidos son opacos, ya que fácilmente pueden absorber radiación en la región visible del espectro electromagnético. Todos los álcalis forman sólidos metálicos.

El tipo particular de enlace que presenta un sólido, se puede determinar experimentalmente mediante estudios de difracción de rayos-X, propiedades dieléctricas, emisiones ópticas, y así sucesivamente. Existen algunos sólidos cuyo enlace puede ser interpretado como una mezcla de los tipos principales que han sido descritos. Además, no todos los sólidos poseen la estructura ideal que ha sido implicada en el análisis hasta este momento. De hecho, las llamadas imperfecciones de la red o desviaciones de la estructura cristalina ideal, conducen a muchas propiedades de los sólidos que son de gran importancia práctica por sus consecuencias.

13.3 Teoría de bandas de los sólidos

Para poder entender el efecto de poner muchos átomos muy próximos entre sí en un sólido, primero se considerarán dos átomos que inicialmente se encuentran muy alejados uno del otro. En este sistema de dos átomos, todos los niveles de energía poseen una degeneración por intercambio doble. Es decir, para el sistema combinado, la parte espacial de la eigenfunción para los electrones puede contener, ya sea una combinación de eigenfunciones espaciales de los átomos individuales que es simétrica ante un intercambio de pares de marcas de los electrones, o que es antisimétrica ante ese mismo intercambio de marcas. (Desde luego, la eigenfunción total del sistema es antisimétrica ya que la eigenfunción espacial simétrica está asociada con una eigenfunción de spin antisimétrica y viceversa). Cuando los átomos se encuentran bastante separados, los dos tipos diferentes de eigenfunciones conducen a la misma energía y por lo tanto se dice que cada nivel de energía tiene una doble degeneración de intercambio. Sin embargo, cuando los átomos se encuentran próximos entre sí, la degeneración por intercambio se elimina. La energía del sistema depende de la simetría de las eigenfunciones espaciales, porque la densidad electrónica en la importante región interatómica depende de que la eigenfunción espacial sea simétrica o antisimétrica cuando los átomos se encuentran tan próximos que las funciones de onda de los átomos individuales se traslapen. Por lo tanto, un nivel de energía dado del sistema se divide en dos niveles de energía distintos cuando empieza el traslape, y la división de niveles aumenta a medida que la separación entre los átomos disminuye. Desde luego que un ejemplo famoso de este fenómeno se encuentra en el nivel de energía correspondiente al estado base de un sistema que contiene dos átomos de hidrógeno, como se vió en la sección 12-3. En la figura 12-4 se muestra este desdoblamiento para el nivel del estado base

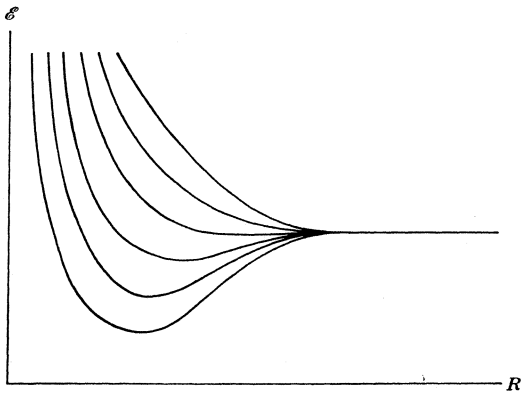


FIGURA 13-1
Dibujo esquemático del desdoblamiento de un nivel de energía como función de la distancia de separación R entre átomos adyacentes en un sistema de seis átomos.

únicamente, pero cada uno de los niveles superiores del sistema se desdobla de la misma forma y por la misma razón, cuando los átomos se aproximan entre sí.

Si se hubiera empezado con tres átomos aislados, se hubiera tenido una degeneración de intercambio triple de los niveles de energía. Cuando se juntan átomos en una red lineal uniforme, cada uno de los niveles se desdobla en tres niveles distintos. Esto se ilustra esquemáticamente en la figura 13-1, para un nivel de energía típico de un sistema de seis átomos. El desdoblamiento empieza cuando la distancia de separación atómica R, de centro a centro, se vuelve suficientemente pequeña para que los átomos empiecen a traslaparse. A medida que R disminuye de este valor, ocurre una disminución en la energía de los niveles para los cuales la simetría de la eigenfunción espacial conduce a una distribución de carga electrónica favorable (es decir, la cual coloca carga electrónica donde los iones ejercen el enlace más fuerte), y un aumento en la energía de los niveles asociado con eigenfunciones espaciales cuya simetría conduce a una distribución de carga no favorable. Entre más o menos favorable sea la distribución de carga, mayor será el aumento o disminución en la energía. Así, los niveles se encuentran separados, por los requisitos cuánticos de indistinguibilidad, con respecto a una energía promedio que sería igual a la energía que tendría el sistema para una R dada, si dichos requisitos no existieran. Obsérvese que esta energía promedio aumenta rápidamente para R suficientemente pequeña. Esto se debe a la repulsión de Coulomb que los iones se ejercen entre sí.

Al considerar un sistema que contiene N átomos de una especie dada, cada nivel de uno de estos átomos conduce a un nivel del sistema de degeneración de orden N, cuando los átomos se encuentran bastante separados. Cuando la separación disminuye, cada uno de estos niveles se desdobla en un conjunto de N niveles. La separación en energía entre el nivel más bajo y el nivel más alto de un conjunto particular, depende de la distancia de separación R, ya que R especifica la magnitud del traslape que ocasiona el desdoblamiento. Sin embargo, no depende de modo significativo del número de átomos en el sistema si se mantiene la misma distancia de separación. Por lo tanto, a medida que se agregan más átomos al sistema, cada conjunto de niveles desdoblados contendrá un mayor número de niveles distribuidos, aproximadamente, en el mismo intervalo de energía a una R particular. Para los valores de R que se encuentran en los sólidos, unos cuantos angstroms, el intervalo de energías es de unos cuantos electrón-volts (ver la figura 12-4). Si entonces se considera que un sólido contiene algo así como 10^{23} átomos/mol,

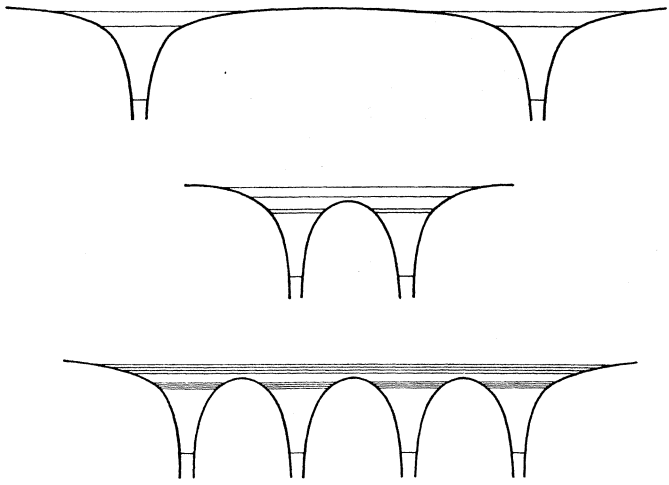


FIGURA 13-2
Arriba: Esquema de niveles de energía para dos átomos aislados. *Al centro.* Esquema de niveles de energía para los mismos dos átomos en una molécula diatómica. *Abajo:* Esquema de niveles de energía para cuatro de los mismos átomos en un cristal rudimentario unidimensional. Obsérvese que los niveles inferiores no se encuentran apreciablemente desdoblados ya que las eigenfunciones atómicas correspondientes a estos niveles, no se traslapan significativamente.

se podrá ver que los niveles de cada conjunto en el sólido se encuentran tan próximos en energía entre sí, que prácticamente forman una *banda* de energía continua.

El proceso que se acaba de describir está indicado en la figura 13-2. De esta figura se puede ver que los niveles de energía más bajos se dispersan menos que los niveles más altos. La razón es que los electrones en los niveles más bajos son electrones de subcapas internas de los átomos y que no son alterados significativamente por la presencia de átomos vecinos. Estos electrones se encuentran localizados en átomos particulares aún cuando R es pequeña, ya que las barreras de potencial entre estos átomos para esos electrones son relativamente altas y anchas. Por otra parte, los electrones de valencia se encuentran totalmente deslocalizados para R pequeña, ya que forman parte del sistema total. El traslape de sus funciones de onda resulta en una separación de sus niveles de energía. Debe subrayarse que el nivel $1s$ de un átomo individual se convierte en una banda de N niveles, así como también sucede para el nivel $2s$ si se cuenta de modo tal, que para cada uno de estos niveles corresponden dos electrones de spin opuesto. Sin embargo, el nivel $2p$ está triplemente degenerado en el número cuántico espacial m_l en el átomo aislado ya que m_l puede tener cualquiera de los valores -1, 0, + 1. Por lo tanto, el nivel $2p$ en el átomo da lugar a $3N$ niveles en el sólido. Como pronto se discutirá, ésto puede pensarse como la formación de tres bandas de N niveles, cuyos intervalos de energía pueden coincidir o no.

En la figura 13-3 se muestra la formación de la banda para los niveles más altos del sodio, cuya configuración del estado base atómico es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. En esta figura se muestran algunas características generales de *bandas permitidas* (bandas continuas de niveles de energía electrónicos) y *bandas prohibidas* (regiones donde no existen niveles de energía electrónicos). Las bandas permitidas que corresponden a subcapas internas como las $2p$ en el sodio, son extremadamente angostas hasta que la distancia interatómica se hace más pequeña que la distancia real

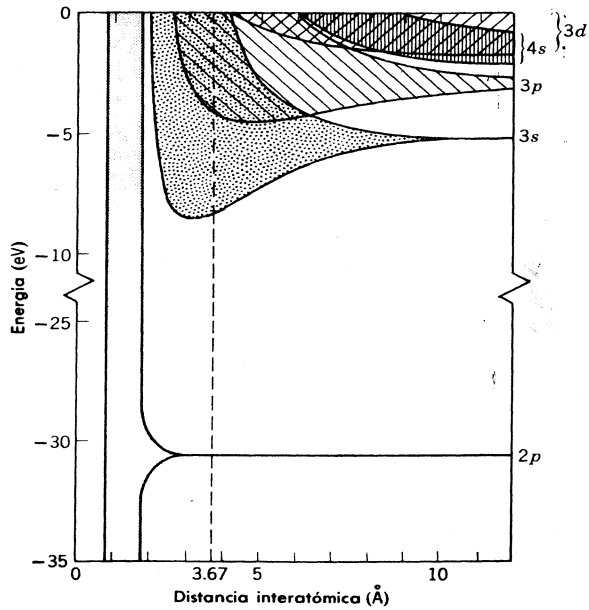


FIGURA 13-3
Se muestra la formación de bandas de energía a partir de los niveles de energía de átomos de sodio aislados, a medida que la separación interatómica disminuye. La línea discontinua indica la separación interatómica observada en el sodio metálico. No se indican las múltiples bandas traslapadas que constituyen las bandas *p* y *d*.

encontrada en el cristal. Sin embargo, al ir de las subcapas ocupadas a las subcapas desocupadas de un átomo en su estado base, a una separación interatómica dada, las bandas se vuelven progresivamente más anchas. La razón es, una vez más, que entre mayor es la energía de los electrones, mayor es la región en la que se pueden mover y mayor es el efecto de los iones vecinos. Por lo tanto, al aumentar la energía, las bandas de energía permitidas se ensanchan y se traslapan.

Una verificación experimental directa de las bandas de energía proviene de la observación de los espectros de rayos-X de los sólidos. Por ejemplo, la transición $3s \rightarrow 2p$ en sodio, produce las líneas de rayos-X de la serie *L*. Para sodio en estado gaseoso, se produce un espectro de líneas bien definidas, ya que los niveles $3s$ y $2p$ son extremadamente angostos. Sin embargo, las mismas líneas de rayos-X correspondientes a sodio sólido, se ensanchan ya que a pesar de que el nivel de energía mas bajo, $2p$, es angosto, el nivel $3s$ es en este caso una banda de energía. La forma observada de las líneas de rayos-X de los sólidos, concuerda con el modelo de bandas de energías.

Considérese ahora la ocupación de los niveles de energía. Aquellas bandas que se originan en niveles electrónicos de capas cerradas de átomos aislados, tienen todos sus niveles ocupados. Las bandas que se originan de los electrones de valencia, pueden o no estar totalmente ocupadas. Si se aplica un campo eléctrico externo al sólido, los electrones podrán adquirir energía extra solo si se tienen niveles vacíos disponibles dentro del intervalo de energías que el electrón puede adquirir por la intensidad del campo aplicado. Si no se tienen niveles vacíos disponibles, entonces, el electrón no podrá obtener energía y el sólido se comportará como un *aislante*. Lo que determina qué tan llenas o vacías se encuentran las bandas de electrones de valencia, es la valencia de los átomos que constituyen el sólido, y la geometría de la red cristalina

en la que solidifican. Una banda *aislada* estará llena, si una celda unitaria de la red cristalina contiene dos electrones de valencia, uno para cada uno de los dos valores del número cuántico de spin m_s.

La geometría de la estructura cristalina es un tema complicado muy importante en la física del estado sólido. En este libro se tratará de evitar el tema, restringiéndose a redes cristalinas particularmente simples (generalmente unidimensionales). Al menos, se define una *celda unitaria* como el arreglo geométrico de átomos más pequeño que por repetición periódica a lo largo de los ejes de coordenadas, puede describir completamente el arreglo geométrico de los átomos del cristal. Asimismo se mencionará que una red cristalina, la degeneración de los electrones atómicos de valencia con respecto al número cuántico m_l se elimina total o parcialmente, ya que estos electrones no se encuentran en el potencial esféricamente simétrico del átomo aislado, sino que se encuentran en un potencial cuya simetría, más complicada, depende de la geometría del cristal. Por esta razón, los tres niveles degenerados correspondientes a la subcapa p de un solo átomo, se convierten en tres bandas de N niveles, cada una de las cuales acomoda dos electrones de spin opuestos, en un cristal que contiene N de estos átomos. Estas bandas pueden no traslaparse, traslaparse parcialmente, o traslaparse totalmente en energía, dependiendo de la geometría del cristal. El término banda *aislada*, utilizado para expresar la condición para una banda llena, corresponde al caso en que estas bandas no se traslapan entre sí o con bandas de otras subcapas. Entonces, si se tienen dos electrones de valencia por celda unitaria, cada uno de los N niveles de la banda más baja, se llenará con esos dos electrones. Obsérvese que la cantidad que determina la ocupación, es el número de electrones de valencia por celda unitaria, y no por átomo. En una red uniforme de átomos idénticos en una dimensión, como la considerada en el argumento del cual se concluyó que una banda contiene N niveles, si el cristal contiene N átomos, una celda unitaria deberá contener un átomo y en este caso no se puede establecer ninguna diferencia. Cuando se extiende este argumento al caso de cristales tridimensionales con átomos de especies diferentes, se encuentra que la conclusión permanece igual, siempre y cuando N sea el número de celdas unitarias del cristal. Por lo tanto, si se tienen dos electrones de valencia por celda unitaria, habrá dos en cada nivel de la banda, y la banda estará completamente llena.

El problema de predecir si un sólido es o no un aislante, radica en el muy importante problema del traslape de bandas que depende de los detalles de la geometría de la estructura cristalina (y de la geometría de las eigenfunciones atómicas). En lo que respecta a la valencia, si lo que debería ser una banda completamente llena se traslapa con lo que debería ser una banda completamente vacía, entonces se tendrán dos bandas parcialmente llenas. El resultado es que el sólido que debió ser un aislante será en realidad un conductor. Sin embargo, al menos es posible afirmar que *definitivamente un sólido no puede ser un aislante a menos que sus celdas unitarias contengan un número par de electrones de valencia*, ya que un número impar de electrones de valencia jamás podrán estar en una banda llena. La mayoría de los sólidos covalentes como el diamante, o sólidos iónicos, como el cloruro de sodio, son aislantes; todos ellos poseen un número par de electrones de valencia por celda unitaria. En el diamante, cada átomo de carbón tiene cuatro electrones de valencia, y hay dos átomos por celda unitaria. Los ocho electrones de valencia por celda unitaria, llenan completamente los $4N$ niveles de cuatro bandas, una que se origina de la subcapa $2s$ del átomo y tres que se originan de las tres subcapas $2p$. Estas bandas se traslapan entre sí, pero se encuentran bastante separadas de bandas vacías de mayor energía. El cloruro de sodio contiene un ión de sodio y un ion de cloro por celda unitaria, y la banda de valencia consiste en un conjunto de bandas completamente llenas que se traslapan entre sí pero que no se traslapan con bandas vacías. Los átomos de tierras alcalinas, como el berilio, son divalentes y forman cristales con un número par de electrones de valencia por celda unitaria, sin embargo, estos sólidos son metales, no aislantes, ya que el traslape de bandas hace que niveles de energía ligeramente altos estén al alcance, energéticamente, de los electrones.

En los sólidos formados de átomos monovalentes, como el sodio alcalino, la banda que contiene a los electrones de valencia no se puede llenar y, por lo tanto, el sólido se comporta como un *conductor*. Sólo la mitad de los niveles de la banda permitida aislada 3*s* del sodio se llenan, porque el átomo de sodio tiene un solo electrón en el nivel 3*s* y el principio de exclusión permite que ese nivel acomode a dos electrones. Por lo tanto, los electrones en el sólido fácilmente pueden adquirir una pequeña cantidad de energía adicional. De esta manera, cualquier campo eléctrico aplicado será efectivo para proporcionar energía a los electrones y el sólido será un conductor. Como se mencionó en el párrafo anterior, los conductores también se encuentran en casos en que las bandas que contienen a los electrones de valencia se traslapan.

Vale la pena establecer la diferencia entre conductores y aislantes del lenguaje de energías al de impulsos. Al no aplicarse un campo eléctrico, existen tantos electrones en el sólido con vectores de impulso en una dirección como los hay con vectores de impulso en la dirección opuesta, ya que no hay una corriente neta. Cuando se aplica un campo eléctrico, este equilibrio se puede alterar ocasionando el flujo de corrientes. Esto es muy posible para electrones en una banda parcialmente llena, pero no lo es para electrones en una banda completamente llena.

Desde luego que, a temperaturas arriba del cero absoluto, es posible que algunos electrones adquieran suficiente energía térmica para saltar el intervalo de energías de la banda prohibida y pasen a una banda permitida más alta, creando en este proceso espacios vacíos en la banda más baja, poniendo en disponibilidad una nueva banda permitida. A la banda casi completamente llena se le llama *banda de valencia* y a la banda casi vacía se le llama *banda de conducción*. La probabilidad de que ésto ocurra aumenta con la temperatura y depende fuertemente de la anchura de la banda prohibida. Las sustancias en las que la brecha de energía es pequeña se les llama *semiconductores*. Un ejemplo es el silicio, sólido covalente con una estructura parecida a la del diamante, pero con una banda prohibida de sólo 1 eV de anchura. Es razonablemente conductor a la temperatura ambiente a pesar de que a bajas temperaturas es un aislante. Por otra parte, el intervalo entre las bandas llena y vacía es de aproximadamente 7 eV para el diamante. Por lo tanto, el diamante es un aislante aún a temperaturas relativamente altas.

13.4 Conducción eléctrica en metales

A partir de ideas clásicas, se pueden obtener resultados muy útiles en relación con la conducción de electrones en metales. Al no aplicarse un campo eléctrico, la dirección en que se mueven estos electrones, es completamente aleatoria. La razón es que con mucha frecuencia, los electrones chocan con imperfecciones en la red cristalina del metal, que resultan del movimiento térmico de los iones respecto a sus posiciones de equilibrio en la red, o a la presencia de iones de impurezas en la red. Al chocar con estas imperfecciones, los electrones sufren cambios en su velocidad y dirección, lo que hace que su movimiento sea al azar. Como en el caso de colisiones moleculares en un gas clásico, la frecuencia de las colisiones electrón-imperfecciones de la red; puede ser descrita por una *trayectoria media libre* λ, donde λ es la distancia promedio que viaja un electrón entre colisiones. Cuando se aplica un campo eléctrico al metal, los electrones modifican su movimiento aleatoria de modo tal que, en promedio, se dirigen lentamente en dirección opuesta a la del campo, ya que su carga es negativa, con una velocidad v_d. Esta velocidad es mucho menor que la velocidad instantánea efectiva $\bar{v}$ del movimiento aleatorio. En cobre v_d es del orden de 10^{-2} cm/seg, mientras que $\bar{v}$ es del orden de 10^7 cm/seg.

La rapidez de desviación puede calcularse en términos del campo eléctrico aplicado E, de $\bar{v}$ y de λ. Cuando se aplica un campo al electrón en el metal, éste experimentará una fuerza de magnitud eE que le imprimirá una aceleración de magnitud a dada por $a = eE/m$. Considérese ahora un electrón que choca con una imperfección de la red. En general, la colisión destruirá momentáneamente la tendencia del electrón a desviarse y éste se moverá en una dirección verdaderamente aleatoria, después de la colisión. Un poco antes de la siguiente colisión, el

electrón habrá cambiado su velocidad, en promedio, por $a\lambda/\bar{v}$ donde $\lambda/\bar{v}$ es el tiempo medio entre colisiones. A ésto es a lo que se le llama velocidad de derrota v_d, de modo que,

$$v_d = \frac{a\lambda}{\bar{v}} = \frac{eE\lambda}{m\bar{v}}$$

Si n es el número de electrones de conducción por unidad de volumen y j es la densidad de corriente, entonces, $v_d = j/ne = eE\lambda/m\bar{v}$. Combinando ésto, con la definición de *resistividad*, $\rho = E/j$, se obtiene

$$\rho = \frac{m\bar{v}}{ne^2\lambda} \tag{13-1a}$$

La ecuación (13-1a) puede tomarse como una afirmación de que los metales están sujetos a la ley de Ohm, ya que las cantidades v y γ que determinan la resistividad p no dependen del campo eléctrico aplicado, lo cual constituye el criterio para que la ley se obedezca.

Frecuentemente, se trabaja con la *conductividad*

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2\lambda}{m\bar{v}} \tag{13-1b}$$

Lo anterior puede ser escrito en una forma más útil definiendo una cantidad mensurable, la *movibilidad* μ dada por la relación entre la velocidad de desviación y el campo eléctrico, es decir,

$$\mu = \frac{v_d}{E} = \frac{e\lambda}{m\bar{v}} \tag{13-1c}$$

Por lo tanto, como $\sigma = ne^2\lambda/m\bar{v}$, se tiene, $\mu = \sigma/ne$ o bien,

$$\sigma = ne\mu \tag{13-2}$$

Si la conducción se realiza por portadores tanto negativos como positivos, la conductividad estará dada por,

$$\sigma = nq_n\mu_n + pq_p\mu_p$$

donde μ_n y μ_p son las movilidades de los portadores negativos y positivos q_n y q_p son sus cargas, y n y p son los números de estos portadores por unidad de volumen. Si la conducción la realizan portadores de carga negativos, la carga q del portador será negativa, mientras que si la conducción la realizan portadores de carga positiva, q será positiva. Como el signo de μ depende del signo de q, cada término en la expresión para σ es siempre positivo.

El signo del portador de carga de la corriente eléctrica en un metal, se puede determinar mediante medidas del *efecto Hall*. Es decir, cuando una placa conductora que lleve corriente se coloca perpendicularmente a un campo magnético, se establece un campo eléctrico que es perpendicular al campo magnético y el flujo de la corriente. Midiendo la diferencia de potencial entre las dos superficies del conductor, es posible deducir el signo y el valor de la cantidad $1/nq$, llamada *coeficiente de Hall*. En este caso, n es el número de portadores de carga por unidad de volumen y q es la carga del portador. El campo eléctrico resulta de una acumulación de portadores de carga en la superficie debido a la fuerza $\mathbf{v}_d \times \mathbf{B}$ que se ejerce sobre ellos cuando se mueven con una velocidad de $\mathbf{v}_d$ a través del campo magnético $\mathbf{B}$.

En algunos metales, como zinc y berilio, por ejemplo, el efecto Hall indica que los portadores de carga netos son positivos. Esto se interpreta como debido a transiciones de electrones de la

TABLA 13-1. Coeficiente de Hall observado y número calculado de electrones libres por átomo.

Metal	$1/nq$ (10^{-10} m^3/coul)	Número/átomo	Metal	$1/nq$ (10^{-10} m^3/coul)	Número/átomo
Na	−2.5	0.99	Be	+2.4	−2.2
K	−4.2	1.1	Zn	+0.33	−2.9
Cu	−0.55	1.3	Cd	+0.60	−2.5
Ag	−0.84	1.3	As	+40	−0.04
Al	−0.30	3.5	Sb	−20	0.09
Li	−1.70	1.0	Bi	−5000	0.0005

banda de valencia llena a la banda de conducción, dejando *agujeros* (niveles de energía desocupados) en la banda de valencia. Estos *agujeros* corresponden a la ausencia de un electrón y se comportan de modo semejante a cargas positivas. Cuando estos espacios vacíos se ocupan por electrones que se mueven bajo la influencia del campo eléctrico, los agujeros se mueven en dirección opuesta a los electrones, como si fueran cargas positivas moviéndose en la dirección del campo. En el caso de metales con una configuración atómica s^2 tales como el zinc y el berilio, la movilidad de los agujeros de la banda s es mucho mayor que la movilidad de los electrones de la banda p. El coeficiente de Hall para estos metales es positivo, ya que el signo de dicho coeficiente depende de cual sea el tipo de portador con la mayor movilidad.

En la tabla 13-1 se enlistan los coeficientes de Hall para algunos metales, así como el número de electrones libres por átomo. Esto último se calcula a partir del valor del coeficiente de Hall, $1/nq$, y la densidad del metal. En el caso de los álcalis y otros metales covalentes, las medidas Hall concuerdan con un electrón de conducción por átomo. Desde luego que el modelo de electrón libre, en el que se basa el análisis simple del efecto Hall, no se espera que sea válido para todos los metales.

13.5 Modelo cuántico del electrón libre

En este punto se recordará la aplicación que se hizo en la sección 11-11, de la teoría cuántica y, la distribución de Fermi a los electrones de conducción en un metal. En esa sección se vió que el potencial en el que se mueven el electrón puede ser aproximado por un pozo de potencial rectangular. Este potencial constante suaviza las variaciones periódicas reales debidas a los iones e incluye el efecto promedio de los electrones restantes. Esto es equivalente a tratar los electrones como un gas ideal de fermiones dentro del sólido. Esta aproximación, que simplifica en gran parte los cálculos mecánico-cuánticos, resulta ser sorprendentemente buena en la determinación de muchas de las propiedades observables de los sólidos, como se vió en la sección 11-12 donde se utilizó en la descripción de fenómenos tales como el potencial de contacto, y el calor específico electrónico. En relación con este estudio, se puede utilizar el resultado (11-56), para la distribución en energía de los electrones libres de conducción en un metal, a saber,

$$n(\mathscr{E})N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3}\,\frac{\mathscr{E}^{1/2}\,d\mathscr{E}}{e^{(\mathscr{E}-\mathscr{E}_F)/kT}+1} \tag{13-3}$$

donde $n(\mathscr{E})N(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ es el número de electrones con energías entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E}+d\mathscr{E}$ en un metal a temperatura T. La justificación se encuentra en que la distribución de estados de energía en una banda, es casi igual a la de electrones libres, si la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$ no se encuentra próxima a

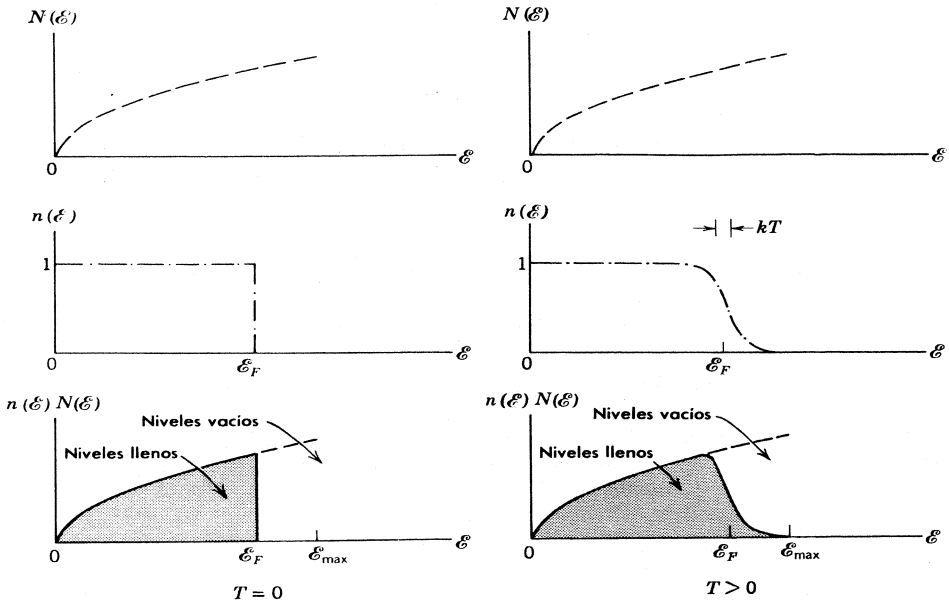


FIGURA 13-4
Izquierda: Distribución de la energía de electrones de conducción en una banda parcialmente llena, de anchura $\mathscr{E}_{\max}$ en un sólido a $T = 0$, de acuerdo con el modelo del electrón libre. *Derecha:* Lo mismo a una temperatura mayor.

la parte superior de la banda. Esta condición se aplica, por ejemplo, a los metales alcalinos, y es la causa del éxito del modelo de electrón libre en la descripción de sus propiedades eléctricas.

Al lado izquierdo de la figura 13-4, se muestra la predicción de (13-3) para la distribución de energías de los electrones a temperatura de cero absoluto en una banda parcialmente llena, midiéndose la energía a partir de la energía más baja de la banda. La energía máxima permitida en la banda es $\mathscr{E}_{\max}$ y $\mathscr{E}_F < \mathscr{E}_{\max}$, como se muestra en esa figura. A temperaturas mayores que cero, los electrones de la parte más alta se excitan y ocupan los estados próximos más altos disponibles y la función de distribución adquiere la forma que se muestra al lado derecho de la figura 13-4. El número de estados cuánticos en un intervalo de energías entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ es el factor $N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E}$ de (13-3), a saber,

$$N(\mathscr{E})\, d\mathscr{E} = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3}\, \mathscr{E}^{1/2}\, d\mathscr{E} \tag{13-4}$$

En la figura 13-4 $N(\mathscr{E})$ se muestra como una curva punteada y corresponde a la *densidad de estados* por unidad de volumen. La curva con puntos y guiones es $n(\mathscr{E})$, correspondiente a la distribución de Fermi del número de electrones por estado. La curva llena (sólida) proporciona el producto $n(\mathscr{E})\, N(\mathscr{E})$, correspondiente a la distribución en energía de los electrones o número de electrones por unidad de intervalo de energía.

Ejemplo 13-1. La energía de Fermi, $\mathscr{E}_F$, para litio es 4.72 eV. a $T = 0$. Calcular el número de electrones de conducción por unidad de volumen en litio.

De (11-53) se tiene

$$\mathscr{E}_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3\mathscr{N}}{\pi V}\right)^{2/3} \qquad \text{para } kT \ll \mathscr{E}_F \quad (13\text{-}5)$$

de modo que el número de electrones libres por unidad de volumen es:

$$n = \frac{\mathscr{N}}{V} = \left(\frac{8m}{h^2}\right)^{3/2} \mathscr{E}_F^{3/2}\frac{\pi}{3}$$

donde m es la masa del electrón. Entonces, con $\mathscr{E}_F = 4.72$ eV se tiene que

$$n = \frac{\mathscr{N}}{V} = \left[\frac{8 \times 9.11 \times 10^{-31}\,\text{kg}}{(6.63 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg})^2}\right]^{3/2} \frac{(4.72 \times 1.60 \times 10^{-19}\,\text{joule})^{3/2}}{3}\,\pi$$
$$= 4.64 \times 10^{28}/\text{m}^3 = 4.64 \times 10^{22}/\text{cm}^3$$

es el número de electrones de conducción por unidad de volumen en litio.

Lo anterior corresponde exactamente a un electrón libre por cada átomo de litio, ya que el número de átomos de litio por unidad de volumen, en litio sólido de densidad 0.534 g/cm^3, es

$$0.534\,\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \times \frac{1\text{ mol}}{6.94\text{ g}} \times 6.02 \times 10^{23}\,\frac{\text{átomos}}{\text{mol}} = 4.64 \times 10^{22}\ \text{átomos/cm}^3 \quad \blacktriangleleft$$

Ejemplo 13-2. Hacer una estimación del número relativo de electrones de conducción en un metal que son excitados térmicamente a estados de mayor energía.

En la figura 13-4 se muestra que la mayoría de los electrones excitados se encuentran en un intervalo $\Delta\mathscr{E}$ sobre la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$, donde $\Delta\mathscr{E} \simeq 2kT$. Suponiendo que $kT \ll \mathscr{E}_F$, el número de electrones excitados $\Delta\mathscr{N}$ se puede calcular de

$$\Delta\mathscr{N} \simeq N(\mathscr{E}_F)n(\mathscr{E}_F)\Delta\mathscr{E} \simeq N(\mathscr{E}_F)(1/2)2kT \simeq N(\mathscr{E}_F)kT$$

De la ecuación (13-5) se obtiene que para $kT \ll \mathscr{E}_F$

$$\mathscr{N} = \frac{\pi V}{3}\left(\frac{8m}{h^2}\right)^{3/2} \mathscr{E}_F^{3/2}$$

y de (13-4) se obtiene que,

$$N(\mathscr{E}_F) = \frac{\pi V}{2}\left(\frac{8m}{h^2}\right)^{3/2} \mathscr{E}_F^{1/2}$$

Por lo tanto,

$$\frac{\Delta\mathscr{N}}{\mathscr{N}} = \frac{N(\mathscr{E}_F)kT}{\mathscr{N}}$$
$$= \frac{\frac{\pi V}{2}\left(\frac{8m}{h^2}\right)^{3/2} \mathscr{E}_F^{1/2}kT}{\frac{\pi V}{3}\left(\frac{8m}{h^2}\right)^{3/2} \mathscr{E}_F^{3/2}}$$
$$= \frac{3}{2}\frac{kT}{\mathscr{E}_F}$$
$$\simeq \frac{kT}{\mathscr{E}_F}$$

La fracción de electrones de conducción que puede ser excitada térmicamente, es pequeña. A la temperatura ambiente $kT \simeq 0.025$ eV, y típicamente $\mathscr{E}_F \simeq 4$ eV, de modo que $\Delta\mathscr{N}/\mathscr{N} \simeq 1/160$. Sin embargo, el número absoluto de electrones de conducción excitados es grande, porque $\mathscr{N}$ de por sí es muy grande. ◀

Enseguida, se utilizará el modelo del electrón libre, para calcular la anchura en energía de una banda para el caso simple de un metal unidimensional. Para un electrón en el pozo de potencial profundo que representa la atracción suavizada de los iones, distribuída uniformemente a lo largo del eje x más la repulsión promedio de los electrones restantes, las eigenfunciones son esencialmente ondas estacionarias senoidales del tipo,

$$\psi \propto \cos\frac{2\pi x}{\lambda} = \cos kx \qquad \text{y} \qquad \psi \propto \operatorname{sen}\frac{2\pi x}{\lambda} = \operatorname{sen} kx \tag{13-6}$$

donde λ es la longitud de onda y $k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda. Las eigenfunciones poseen nodos en los extremos del pozo, ya que sus valores tienden a cero fuera del pozo. Estas condiciones a la frontera conducen inmediatamente al requisito de que $n\lambda/2 = L$, donde L es la longitud del pozo. Cada valor del número entero $n = 1, 2, 3, \ldots$, corresponde a una eigenfunción o nivel de energía diferente, si se permiten dos electrones con spin opuestos por nivel. Como la energía para electrones libres es $\mathscr{E} = p^2/2m = h^2/2m\lambda^2 = h^2n^2/8mL^2$, el valor mínimo de n corresponde al nivel de energía esencialmente cero en el fondo de la banda, mientras que el valor máximo de n corresponde con el nivel de energía máxima en la parte superior de la banda, cuya anchura es aproximadamente igual a esa energía máxima. Si en el metal unidimensional de longitud L hay N iones separados entre sí por una distancia a, entonces, $N = L/a$. Como ya se explicó anteriormente, el número de niveles en la banda es justamente igual a N, de modo que el valor máximo de n también será igual a N. Por lo tanto, la energía máxima, o anchura en energía de la banda del metal unidimensional es

$$\mathscr{E}_{\max} = \frac{h^2N^2}{8mL^2} = \frac{h^2L^2}{8mL^2a^2}$$

o bien,

$$\mathscr{E}_{\max} = \frac{h^2\pi^2}{2ma^2} \tag{13-7}$$

Este resultado que depende de a pero que es independiente de N, confirma la afirmación hecha anteriormente de que la anchura de la banda depende de la separación entre los iones y no de su número en la red.

El modelo del electrón libre proporciona muy buenos resultados para muchos metales. Es especialmente bueno para los metales alcalinos donde el traslape de bandas (como en la figura 13-3 para el sodio) es tan completo, que la densidad de estados $N(\mathscr{E})$ se comporta como las curvas de la figura 13-4. Sin embargo, la dependencia como $\mathscr{E}^{1/2}$ de $N(\mathscr{E})$ con $\mathscr{E}$ no es correcta en el caso de una banda aislada. A pesar de que la forma real de la curva de densidad de estados depende de la posición de la banda y de la estructura de la red, su forma es aproximadamente simétrica, como se muestra en la parte superior de la figura 13-5, en el sentido de que disminuye a cero en la parte superior de la banda.

Para entender como sucede esto, se considera un cristal unidimensional que es tan largo que, en primer lugar, se pueden ignorar las condiciones a la frontera en sus extremos. Después, las eigenfunciones más convenientes para un electrón libre, son ondas viajeras senoidales del tipo,

$$\psi \propto e^{ikx} \qquad \text{y} \qquad \psi \propto e^{-ikx} \tag{13-8}$$

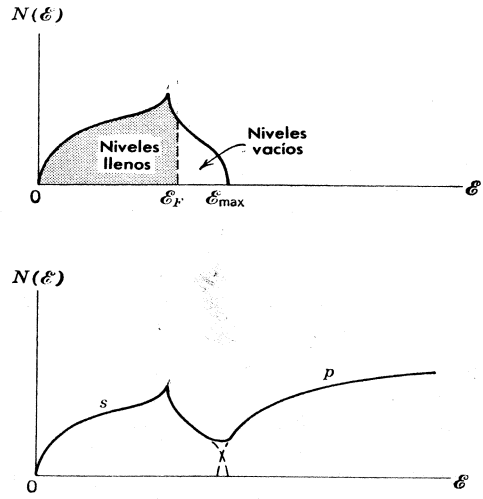


FIGURA 13-5
Arriba: Representación cualitativa de la densidad de estados como función de la energía, en una banda aislada. *Abajo:* Lo mismo, pero para el caso de dos bandas traslapadas ligeramente.

donde las expresiones con exponenciales positivas o negativas describen a un electrón que se mueve en la dirección positiva o negativa del eje x. Es más conveniente aún tomar sólo la forma $\psi \propto e^{ikx}$, donde k puede ser positiva o negativa. Enseguida, se puede escribir la energía $\mathscr{E}$ de un electrón libre en términos de su número de onda $k = p/\hbar$, donde p es su impulso. Es decir:

$$\mathscr{E} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{13-9}$$

La gráfica de esta relación está en la figura 13-6, en un intervalo de valores de k que incluye tanto valores positivos como negativos. Un valor positivo de k corresponde a un electrón que se mueve en la dirección positiva de x, y el valor negativo de k corresponde al movimiento en la dirección opuesta. La energía depende de k^2, y son simétricas respecto a $k = 0$. Comparando (13-7) con (13-9) se puede ver inmediatamente que

$$-\pi/a \leq k \leq +\pi/a \tag{13-10}$$

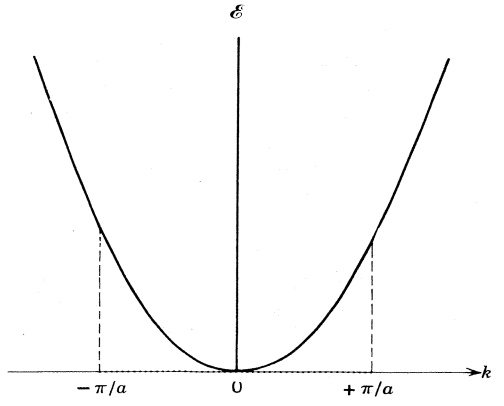


FIGURA 13-6
Energía de un electrón libre graficada como función del número de onda k. Los puntos indican esquemáticamente, los valores permitidos, uniformemente espaciados, de k. Para la primera banda del cristal, todos estos valores quedan dentro del intervalo $-\pi/a \leq k \leq +\pi/a$, donde a es la separación entre los iones de una red unidimensional en la que el electrón se mueve libremente.

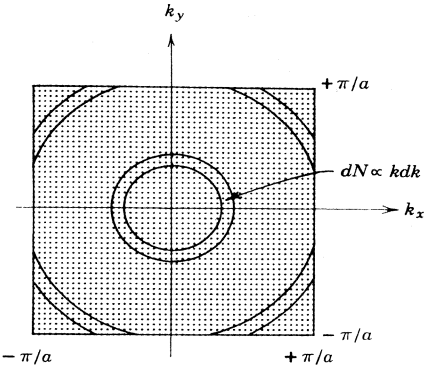


FIGURA 13-7
Se muestra la distribución uniforme de los valores permitidos de las componentes x y y del vector de onda para un electrón libre en la primera banda de una red cuadrada, bidimensional, con separación interiónica a.

Es decir, los valores de k que corresponden al valor máximo de $\mathscr{E}$ en la banda son $-\pi/a$ y $+\pi/a$, y el valor de k correspondiente al valor mínimo $\mathscr{E} = 0$, es $k = 0$ en el medio del intervalo, como $k \propto 1/\lambda \propto n$ y $n = 1, 2, 3,....$, entonces, los valores de k permitidos por las condiciones a la frontera, se encuentran equidistantes en todo este intervalo. Cada uno de ellos está asociado con un estado cuántico diferente del electrón.

Considérese ahora un metal bidimensional cuyos iones se encuentran igualmente espaciados a una distancia a en ambas direcciones x y y. Los valores permitidos de las componentes x y y del número de onda, k_x y k_y, se encuentran uniformemente distribuídos en la banda, en un intervalo que se extiende de $-\pi/a$ a $+\pi/a$, como se muestra en la figura 13-7. Cada pareja de valores k_x, y k_y define un punto que especifica un estado cuántico. Para un electrón libre en el metal, estos puntos se encuentran uniformemente distribuidos dentro del cuadro. Un círculo de radio k respecto al origen, donde $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, pasa por todos los estados de igual energía, ya que en dos dimensiones, la ecuación (13-9) queda,

$$\mathscr{E} = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

El número de estados dN, para valores de k en el intervalo entre k y $k + dk$ es igual al número de puntos contenidos en el área demarcada entre k y $k + dk$. Como los puntos se encuentran distribuidos uniformemente, este número será proporcional al área. En la figura se muestra que siempre que $k < \pi/a$, dN aumenta conforme aumenta k; específicamente $dN = 2\pi k\, dk$. Cuando k empieza a rebasar π los aumentos sucesivos de k producen una disminución en dN. Por lo tanto, $dN/dk = N(k)$ el número de estados por unidad de intervalo de número de onda aumenta desde cero, para k pequeña, alcanza un máximo y vuelve a cero cuando k alcanza el valor más grande permitido para la banda del metal bidimensional.

Al convertir estos resultados de $N(k)$ a $N(\mathscr{E})$, el número de estados por unidad de energía se encuentra el mismo comportamiento general. También es válido para un metal tridimensional real. Es decir, la densidad de estados $N(\mathscr{E})$ aumenta desde cero, para $\mathscr{E}$ pequeña (fondo de la banda), alcanza un máximo, decreciendo después hasta cero para el valor máximo $\mathscr{E}_{\max}$ que se encuentra en la banda (parte superior de la banda). El comportamiento detallado de $N(\mathscr{E})$ depende de dos detalles geométricos del arreglo de los iones en el metal cristalino, así como también el valor exacto de $\mathscr{E}_{\max}$. Sin embargo, el comportamiento general siempre es como se indicó y el valor de $\mathscr{E}_{\max}$ se obtiene aproximadamente de (13-7) si a se interpreta como la distancia entre iones característica del cristal.

13.6 Movimiento de electrones en una red periódica

El modelo del electrón libre que se ha utilizado, ignora los efectos debidos a interacciones de los electrones con la red cristalina. Se empezará a considerarlos haciendo algunas afirmaciones generales acerca del efecto de la variación periódica en el potencial. Por un lado la periodicidad de la red tiene el efecto de que las funciones de onda para una red infinitamente larga ya no sean ondas senoidales viajeras de amplitud constante, sino que presentan la periodicidad de la red en sus amplitudes. Además, los electrones pueden ser dispersados por la red. De la misma manera como una onda electromagnética sufre una "reflexión" de Bragg, al satisfacerse la condición de Bragg; asimismo, cuando la longitud de onda de de Broglie del electrón corresponde a la periodicidad del espaciamiento de los iones, el electrón interactúa particularmente fuerte con la red. Se verá que estas modificaciones resultan, entre otras cosas, en cambios de la resistencia del cristal a la conducción de electricidad.

El enfoque utilizado para encontrar las energías permitidas de los electrones en sólidos, ha sido el de considerar el efecto de formar un sólido al ir aproximando los átomos que lo constituyen. Por otra parte, si se hubiere empezado por modelar el potencial periódico que experimenta un electrón en la red cristalina, por una serie de pozos cuadrados y barreras de potencial, entonces, si se resuelve la ecuación de Schrödinger para ese potencial, se encuentra que las soluciones son ondas senoidales en ciertos intervalos de energías (las bandas permitidas), y ondas exponenciales decrecientes, en otros intervalos de energía, (las bandas prohibidas). Este enfoque permite cálculos cuantitativos detallados, pero aquí se presenta sólo cualitativamente.

A pesar de que los electrones tienden a suavizar las variaciones del potencial debido a los iones, dicho potencial no es constante sino que varía de modo periódico. La forma real del potencial determina la solución exacta de la ecuación Schrödinger para un electrón en la red cristalina, pero la característica más importante del potencial es su periodicidad. El efecto de la periodicidad es el de cambiar la eigenfunción correspondiente a una onda viajera de una partícula libre de modo tal, que en lugar de que tenga amplitud constante, tiene una amplitud variable que cambia con el periodo de la red. Si la periodicidad espacial de la red es a, entonces, de acuerdo con Bloch, las eigenfunciones para un sistema unidimensional no tienen la forma de una onda viajera de partícula libre $\psi(x) = Ae^{ikx}$ de (13-8), sino que tiene la forma:

$$\psi(x) = u_k(x)e^{ikx} \tag{13-11a}$$

donde la periodicidad de la red requiere que:

$$u_k(x) = u_k(x + a) = u_k(x + na) \tag{13-11b}$$

donde n es un entero. Por lo tanto, el efecto de la periodicidad es el de modular periódicamente la solución para la amplitud del electrón libre. La función de onda es:

$$\Psi(x,t) = u_k(x)e^{i(kx-\omega t)} \tag{13-12}$$

donde el segundo factor (exponencial) describe una onda de longitud onda $\lambda = 2\pi/k$ que viaja hacia $+x$ si $k > 0$ y hacia $-x$ si $k < 0$, y el primer factor $u_k(x)$ describe la modulación. La función $u_k(x)$ se parece a la eigenfunción de un átomo aislado. Su forma exacta depende del potencial particular que se suponga y del valor de k. Una buena aproximación para $V(x)$ de un cristal es un arreglo de pozos y barreras rectangulares de potencial que tienen la periodicidad de la red, como se muestra en la figura 13-8. Cada pozo de potencial representa una aproximación al potencial producido por un ion. Este es el *modelo de Kronig-Penney* que, desde luego, es más fácil de tratar matemáticamente, que el caso real, pero que mantiene todas las características importantes. Enseguida se examinará el modelo con más detalle.

Para pozos profundos y ampliamente separados, el electrón de no muy alta energía se encuentra prácticamente ligado dentro de un pozo, de modo que los eigenvalores más bajos son

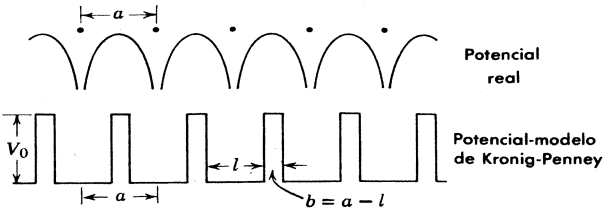


FIGURA 13-8
Ilustración de como se puede aproximar el potencial para un electrón que se mueve en una red periódica mediante el modelo de Kronig-Penney que consiste en un arreglo de pozos y barreras rectangulares de potencial.

los correspondientes a un sólo pozo. Para pozos que se encuentran más próximos, las eigenfunciones pueden penetrar las barreras de potencial más fácilmente. Esto produce un ensanchamiento de lo que anteriormente era un sólo nivel, para más de una banda de niveles de energía. A medida que la separación entre los pozos se reduce, la banda se vuelve más ancha. De hecho, en el límite, cuando la anchura de la barrera es cero, se obtiene un sólo pozo infinitamente ancho en el que todas las energías son permitidas, es decir, se obtiene el modelo del electrón libre. En la figura 13-9 se comparan las energías permitidas para un pozo sencillo

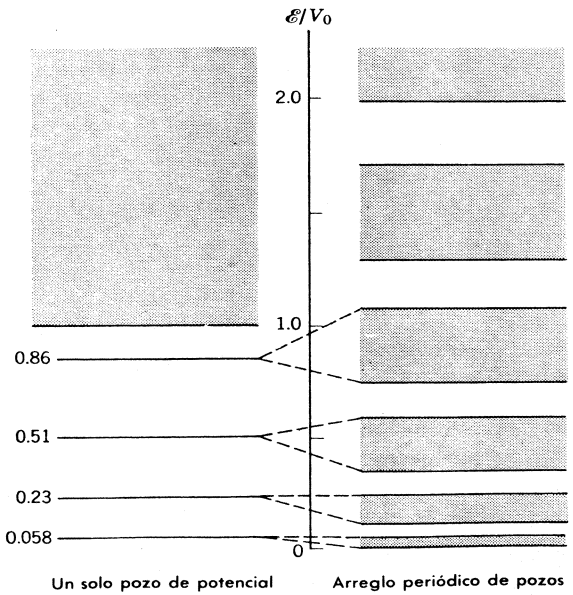


FIGURA 13-9
Izquierda: Energías permitidas para un electrón en un solo pozo de potencial. *Derecha:* Energías permitidas en un arreglo periódico de pozos y barreras. Los niveles que se muestran corresponden a una intensidad del pozo dada por $2mV_0l^2/\hbar^2 = (11)^2$, y un espesor de la barrera dada por $b = l/16$. Obsérvese como aparecen bandas prohibidas aún para energías $\mathscr{E}$ mayores que V_0.

con las del modelo de Kronig-Penney de un arreglo de pozos y barreras. Obsérvese que cada banda permitida corresponde a un nivel discreto de un pozo sencillo y que las bandas prohibidas aparecen aún para energías $\mathscr{E}$ mayores que V_0, o sea, la profundidad del pozo. La anchura de las bandas puede aproximarse a la anchura de los niveles cuando a aumenta (la anchura de los pozos individuales l permanece fija) y tiende a un continuo, a medida que a disminuye.

Al resolver la ecuación de Schrödinger para el modelo de Kronig-Penney, se deben satisfacer las condiciones de continuidad en ψ y $d\psi/dx$, de la misma forma como se hizo en el caso del pozo rectangular. Esto restringe la validez de la solución de Bloch, (13-11a) y (13-11b) a ciertos intervalos de energía dando así las bandas permitidas. Para valores de la energía en las bandas prohibidas, las eigenfunciones decaen rápidamente a través de un factor exponencial real. La expresión $\mathscr{E}(k)$ para las energías permitidas en términos del número de onda k del electrón es más complicada que la correspondiente al electrón libre, pero las discontinuidades en energía siempre ocurren en valores k dados simplemente por,

$$k = \pm \frac{\pi}{a}, \pm \frac{2\pi}{a}, \pm \frac{3\pi}{a}, \ldots \tag{13-13}$$

en donde a es la periodicidad de la red. En la figura 13-10 se presenta una gráfica de $\mathscr{E}(k)$. A los valores de k iguales a los especificados en (13-13) se obtienen discontinuidades en la energía, mientras que para valores de k lejanos de esos valores, las energías son muy parecidas a las del electrón libre que se indican en la curva discontinua de esa figura. De la figura, es evidente el origen de las bandas permitidas y prohibidas. Cada banda permitida corresponde a soluciones de la ecuación de Schrödinger en la que el número de onda k toma valores positivos en un intervalo de anchura $\frac{\pi}{a}$ y también valores negativos en un intervalo de la misma anchura. Obsérvese que

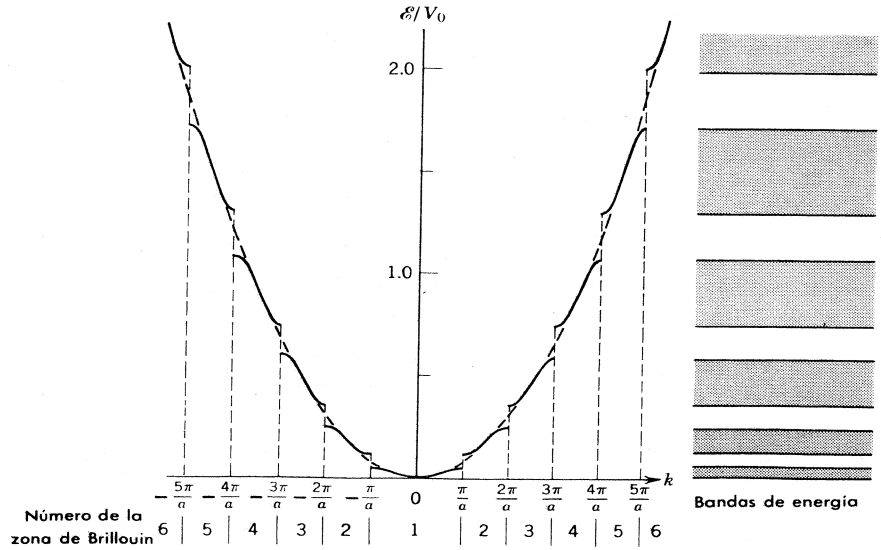


FIGURA 13-10
Energías permitidas en una red unidimensional de periodicidad a, como función del número de onda k. Para comparación, la curva discontinua proporciona el resultado debido al modelo del electrón libre. Las bandas de energía permitidas y prohibidas que resultan se muestran a la derecha.

lo anterior concuerda con la conclusión obtenida desde un punto de vista muy diferente en la última sección y expresada en (13-10).

Desde este punto de vista, los intervalos entre la parte superior de una banda permitida y la parte inferior de la siguiente hacia arriba, se pueden entender como consecuencias de una reflexión de Bragg de la onda viajera que representa al electrón propagándose por la red. Si una onda que viaja hacia la derecha incide sobre un conjunto de barreras que representan regiones entre los iones de la red; espaciadas una distancia uniforme a, será parcialmente reflejada por cada una de estas barreras. Por lo general, las ondas reflejadas que viajan hacia la izquierda no estarán exactamente en fase entre sí y por lo tanto no podrán combinarse constructivamente para producir una onda reflejada neta de amplitud grande. Sin embargo, estarán en fase si la longitud de onda λ de las ondas incidente y reflejada, está relacionada con el espaciamiento a a través de la versión unidimensional de (3-3), la *condición de Bragg*.

$$2a = \lambda, 2\lambda, 3\lambda, \ldots \qquad (13\text{-}14)$$

En este caso, $2a$ es la distancia extra que viaja por la reflexión de barreras sucesivas, de modo que si es igual a un número entero de longitudes de onda λ las ondas reflejadas estarán exactamente en fase y habrá una onda reflejada neta cuya amplitud sea igual a la amplitud de la onda incidente. Ya que $\lambda = 2\pi/k$, la condición de Bragg es $2a = 2\pi/k$, $2(2\pi/k)$, $3(2\pi/k)$, ..., o bien, $k = \pm\pi/a$, $\pm 2\pi/a$, $\pm 3\pi/a, \ldots$, donde se han introducido los signos $\pm$ para tomar en cuenta el hecho de que la onda incidente podría moverse hacia la izquierda (hacia $-x$) o hacia la derecha (hacia $+x$). Comparando con (13-13), se puede ver que los valores de k a los cuales ocurren las discontinuidades en $\mathscr{E}(k)$ son justamente aquellos valores del número de onda para los cuales la longitud de onda λ satisface la condición de Bragg para reflexión constructiva.

Las discontinuidades en sí, ocurren porque hay dos modos diferentes en que la amplitud de la onda reflejada es igual a la amplitud de la onda incidente, en cada valor crítico de k donde estas amplitudes son iguales. Por ejemplo, considérese una onda incidente de amplitud unitaria moviéndose hacia la derecha a lo largo del eje x con $k = \pi/a$. La eigenfunción de la onda viajera que describe ésto es, $e^{ikx} = e^{i\pi x/a}$. La onda reflejada, que también posee amplitud unitaria para este valor de k, es $e^{-ikx} = e^{-i\pi x/a}$. La eigenfunción total se obtiene sumando estas dos, o bien, restándolas. De la primera posibilidad se obtiene

$$\psi = e^{i(\pi/a)x} + e^{-i(\pi/a)x} \propto \cos\frac{\pi}{a}x \qquad (13\text{-}15)$$

y de la segunda

$$\psi = e^{i(\pi/a)x} - e^{-i(\pi/a)x} \propto \operatorname{sen}\frac{\pi}{a}x \qquad (13\text{-}16)$$

En ambos casos, la onda reflejada tiene la misma amplitud que la onda incidente y por lo tanto se combinan para dar una onda estacionaria; sin embargo, ambos casos difieren de modo muy significativo en lo que respecta a la posición de los nodos, de la onda estacionaria y por lo tanto, en la posición de los máximos y mínimos de la densidad de probabilidad $\psi^*\psi$. En el caso en que $\psi \propto \cos \pi x/a$, la densidad de probabilidad será máxima en $x = 0$, así como también en $x = \pm a, \pm 2a, \pm 3a, \ldots$, mientras que para $\psi \propto \operatorname{sen} \pi x/a$ la densidad de probabilidad será cero en todos esos puntos. Si ésas son las posiciones de las barreras entre los iones, el electrón descrito por ψ experimentará una repulsión mayor y, por lo tanto, tendrá una energía mayor en el caso del coseno que en el caso del seno. Si estos puntos corresponden a la posición de los iones, la situación se invierte. Pero la conclusión básica (que hay dos energías diferentes $\mathscr{E}$ correspondientes al mismo valor del número de onda k cuando k es cualquiera de los valores dados por (13-13)) es independiente de cómo se defina el origen del eje x.

Examinando una vez más la función $\mathscr{E}(k)$ que se grafica en la figura (13-10), se pueden ver los dos valores diferentes de $\mathscr{E}$ en cada uno de los valores críticos de k, donde ocurrirá la reflexión de Bragg. Puede verse también, como esta circunstancia ocasiona que la curva $\mathscr{E}(k)$ tenga una desviación, en forma de S, de la curva parabólica para un electrón libre en cada región entre los valores críticos de k. El intervalo de valores de k, entre $-\pi/a$ y $+\pi/a$ define lo que se denomina *primera zona de Brillouin.* Los valores de k comprendidos entre $-2\pi/a$ y $-\pi/a$ y entre $+\pi/a$ y $+2\pi/a$ definen la segunda zona de Brillouin, etc., como se indica abajo del eje k en la figura.

13.7 Masa efectiva

Al estudiar el comportamiento de un electrón en una red periódica bajo la influencia de un campo eléctrico externo, es muy conveniente introducir el concepto de masa efectiva del electrón. Esto se puede hacer utilizando una relación desarrollada en la sección 3-4 para describir el movimiento de un electrón en términos de un *grupo* de ondas viajeras. De acuerdo con (13-13b), la velocidad 9 de ese grupo sería igual a la deriva de las frecuencias ν de las ondas viajeras senoidales componentes, con respecto a sus longitudes de onda recíprocas k. Es decir,

$$g = \frac{d\nu}{d\kappa} = \frac{d\omega}{dk}$$

donde ν se convierte a la frecuencia angular ω y κ al número de onda k, multiplicando y dividiendo $d\nu/d\kappa$ por 2π. Para recordar al estudiante el significado de esta relación, se aplicará el caso sencillo de un electrón libre, cuya energía es:

$$\mathscr{E} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega$$

La última igualdad depende de la relación de Einstein-de Broglie $\mathscr{E} = h\nu = \hbar\omega$. Evaluando $d\omega/dk$ de esta expresión, se tiene que

$$g \equiv \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar 2k}{2m} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = \frac{mv}{m} = v \tag{13-17}$$

Se obtiene el resultado correcto de que la velocidad de grupo g es igual a la velocidad v del electrón cuyo movimiento está representado por el grupo. Desde luego que este resultado es de validez general.

Enseguida, se considera un electrón en una red unidimensional, cuyo número de onda depende de la energía en la forma $\mathscr{E}(k)$ que se ha venido analizando. A este sistema se le aplica un campo eléctrico *externo* E. En un tiempo dt, el electrón de carga q se mueve una distancia dx y el trabajo realizado por el campo externo, será la fuerza aplicada qE multiplicada por dx. Como ésto es igual a la magnitud del cambio en la energía del electrón $d\mathscr{E}$ utilizando (13-17) se obtiene

$$d\mathscr{E} = qE\,dx = qE\frac{dx}{dt}\,dt = qEv\,dt = qEg\,dt$$

Pero de $\mathscr{E} = \hbar\omega$ también se tiene

$$d\mathscr{E} = \hbar\,d\omega = \hbar\frac{d\omega}{dk}\,dk = \hbar g\,dk$$

comparando, se obtiene que

$$qE\,dt = \hbar\,dk$$

o bien,

$$\hbar\frac{dk}{dt} = qE \tag{13-18}$$

Si se toma la derivada respecto al tiempo de

$$g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{d\mathscr{E}}{dk}$$

se obtiene

$$\frac{dg}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2\mathscr{E}}{dt\,dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2\mathscr{E}}{dk\,dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2\mathscr{E}}{dk^2}\frac{dk}{dt}$$

o bien, utilizando (13-18)

$$\frac{dg}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\mathscr{E}}{dk^2}qE$$

Una vez más, empleando (13-17), lo anterior puede escribirse como,

$$\frac{dv}{dt} = \frac{qE}{m^*} \tag{13-19a}$$

donde

$$\frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\mathscr{E}}{dk^2} \tag{13-19b}$$

La cantidad de $1/m^*$ es el recíproco de la *masa efectiva* del electrón en la red cristalina.

El electrón que se está estudiando se mueve bajo la influencia de fuerzas internas que ejercen sobre él los iones de la red, y una fuerza externa que ejerce sobre él el campo eléctrico aplicado E. Si se desea, (13-19a) puede ser utilizada para estudiar el movimiento en *términos de la fuerza externa solamente*, ya que esa ecuación tiene la forma de la ley de movimiento de Newton: aceleración es igual a la fuerza externa dividida entre la masa. Desde luego que los efectos debidos a fuerzas internas ya están incluídos en la ecuación. Sin embargo, aparecen en la masa efectiva $1/m^*$ únicamente, la cual puede tomar valores bastante diferentes del recíproco de la masa verdadera del electrón, $1/m$.

Las propiedades de la red determinan $1/m^*$ ya que, como se vió antes en la sección precedente, determinan la forma de la función $\mathscr{E}(k)$ y también su derivada $d^2\mathscr{E}(k)/dk^2$ que aparece en (13-19b). En la figura 13-11 se muestra la primera y parte de la segunda zonas de Brillouin para un cristal unidimensional. La curva sólida es $\mathscr{E}(k)$ y la curva parabólica punteada es la relación para el electrón libre $\mathscr{E} = \hbar^2k^2/2m$. Cerca del centro de la primera zona, donde $\mathscr{E}(k) \simeq \hbar^2k^2/2m$, $1/m^* = (d^2\mathscr{E}/dk^2)/\hbar^2 \simeq (\hbar^2 2/2m)/\hbar^2 = 1/m$. Por lo tanto, en esta región la red tiene muy poco efecto sobre el electrón, ya que su recíproco de la masa efectiva es casi igual al recíproco de la masa efectiva y responde al campo eléctrico aplicado como si fuera un electrón esencialmente libre. La curvatura de la función $\mathscr{E}(k)$ cambia significativamente de la curvatura de la parábola, al proceder en cualquier dirección a partir del centro de la zona lo que provoca cambios dramáticos en el recíproco de la masa efectiva del electrón y, por lo tanto, en su respuesta al campo aplicado. Como $d^2\mathscr{E}/dk^2$ se hace cero y luego se vuelve negativa y de magnitud grande, a medida que k =

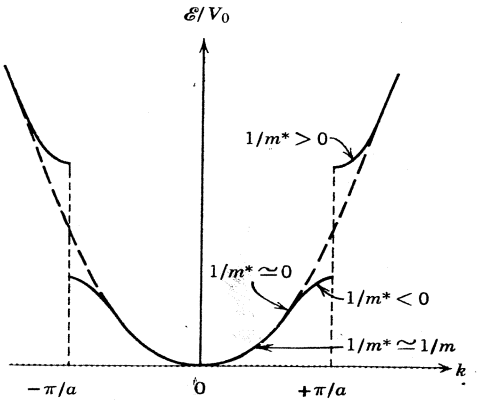


FIGURA 13-11
Ilustración de la masa efectiva recíproca en varios puntos de la primera y segunda zonas de Brillouin para una red unidimensional. Los puntos en el eje de las k indican los valores permitidos y uniformemente distribuidos de k.

aproxima a cualquiera de las fronteras de la primera zona, $1/m^*$ hace lo mismo. Por lo tanto, en la parte superior del intervalo de energías de la banda correspondiente a la primera zona, el electrón en la red responde de modo muy diferente al campo eléctrico aplicado, en comparación como la haría si fuera un electrón libre. Donde $1/m^*$ es cero, una fuerza aplicada dada qE no ocasiona aceleración en el electrón, y cuando $1/m^*$ es negativa, la fuerza produce una aceleración en dirección opuesta a la que experimentaría el electrón libre. (Esto no tiene que ver con el signo de la carga electrónica, la cual para evitar confusión, se ha escrito como q en lugar de $-e$). Para la segunda zona de Brillouin, en el fondo de la banda de energía, $1/m^*$ es positiva pero apreciablemente mayor que $1/m$ para un electrón libre, de modo que la fuerza aplicada produce una aceleración del electrón en la red relativamente grande.

La respuesta de un electrón en un cristal a un campo eléctrico aplicado puede ser entendida en términos de la manera como se refleja la onda electrónica por las barreras de potencial localizadas entre cada par de iones. En el fondo de la primera banda de energía, donde la magnitud del número de onda tiene el valor $|k| \simeq 0$ prácticamente no hay reflexión, ya que la condición de Bragg $|k| = \pi/a$ está lejos de satisfacerse. Al aplicarse el campo, la fuerza que produce aumentará el impulso del electrón y el trabajo que realiza aumentará la energía del electrón, igual que en el caso del electrón libre. Más arriba en la banda, cuando $|k|$ se acerca al valor crítico de Bragg π/a, la reflexión empieza a volverse apreciable. En esta región, el trabajo realizado sobre el electrón seguirá aumentando su energía, pero ésto aumenta la cantidad de reflexión y reflexión corresponde a invertir el signo de su impulso. En el punto donde $1/m^* = 0$, la ganancia del impulso positivo debido al campo aplicado que actúa directamente sobre el electrón se compensa exactamente por la ganancia de impulso negativo debido al aumento en las reflexiones del electrón de los iones de la red. En esta situación el cambio neto en la velocidad del electrón es cero y desde el punto de vista de su respuesta al campo aplicado, el electrón posee, de modo efectivo, masa infinita o masa recíproca cero. (Desde luego que la red recibe impulso en el efecto general de aplicar un campo, pero no el electrón). En la parte superior de la banda, la masa efectiva recíproca es grande y negativa ya que el aumento en las reflexiones que resultan de la aproximación de la condición de Bragg para reflexión perfecta, es mucho más significativo en cambiar el impulso del electrón que la acción directa del campo aplicado. Esta situación se invierte en el fondo de la siguiente banda hacia arriba y, por lo tanto, la masa efectiva recíproca es grande y positiva en ese punto.

La masa efectiva también se utiliza, de un modo un tanto diferente, para comparar para varias bandas, la curvatura de la función $\mathscr{E}(k)$ en las regiones cóncavas hacia arriba, aproximadamente parabólicas, que se encuentran cerca de la parte superior de las bandas. Si se toma el cero de la k para que esté en la fontera de la segunda zona, y el cero de $\mathscr{E}$ se toma en el fondo de la

banda correspondiente, entonces $\mathscr{E}(k)$ para la parte de la segunda zona que se muestra en la figura 13-11, puede escribirse como,

$$\mathscr{E}(k) \simeq \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{13-20}$$

Si la curvatura de $\mathscr{E}(k)$ es grande, de modo que $\mathscr{E}$ aumenta rápidamente conforme k aumenta entonces $1/m^*$ es grande en esta expresión. Como los valores de k se encuentran uniformemente distribuidos a lo largo del eje k de la figura 13-11, la densidad de niveles correspondiente a lo largo del eje, será baja si $\mathscr{E}$ aumenta rápidamente conforme aumenta k. Por lo tanto, la masa recíproca también se puede utilizar para comparar *densidades de niveles de las bandas*, en regiones donde están sujetos a (13-20). Si la densidad de niveles es relativamente baja, $1/m^*$ es relativamente grande; si la densidad de niveles es relativamente alta, $1/m^*$ es relativamente pequeña.

El concepto de masa efectiva es útil en una gran variedad de formas. Por ejemplo, la teoría clásica acerca del comportamiento de portadores de carga bajo la influencia de un campo eléctrico aplicado se resume en (13-1b), que predice que la conductividad eléctrica σ del material que contiene a los portadores, es proporcional al recíproco de sus masas. Esto se puede modificar fácilmente para tomar en cuenta el comportamiento cuántico de los electrones portadores de carga en una red cristalina, sustituyendo la masa recíproca verdadera, por la masa recíproca efectiva, obteniéndose

$$\sigma \propto \frac{1}{m^*} \tag{13-21}$$

Considérese el hierro. Los electrones de valencia de este metal llenan sus bandas $3d$ parcialmente, que se encuentran traslapadas y son angostas ya que la subcapa $3d$ es una subcapa *interna* en el elemento de transición hierro, de modo que el desdoblamiento del nivel $3d$ atómico, en las bandas $3d$, no es muy pronunciado. Dado que las bandas son angostas, la densidad de niveles es alta. Por lo tanto, la masa efectiva recíproca es pequeña para los electrones implicados en la conducción eléctrica del fierro, siendo el valor de $1/m^*$ aproximadamente $0.1/m$. Consecuentemente, este metal no es un buen conductor eléctrico. La razón es que para el cobre, las bandas $3d$ se encuentran llenas y los electrones de conducción son electrones $4s$, los cuales se encuentran en una banda muy ancha (traslapa las bandas $3d$), con una baja densidad de niveles y una masa efectiva recíproca grande ($1/m^*$ es aproximadamente igual a $1/m$). La banda $4s$ es ancha, porque éste es una subcapa *externa* del átomo y, por lo tanto, el desdoblamiento en el cristal de los niveles $4s$ es grande. El resultado es que la conductividad del cobre es un orden de magnitud mayor que la conductividad del hierro.

Debe hacerse notar que el uso de la masa efectiva recíproca en (13-21) significa tomar en cuenta la influencia de una red cristalina perfecta sobre el movimiento acelerado de un electrón en un campo eléctrico aplicado. Como se estudió en la sección 13-4, el movimiento acelerado tiene lugar entre las colisiones de los electrones con las imperfecciones que realmente se encuentran en la red de un material real, debidas al movimiento térmico de los iones ó ahiones de impureza. Estas colisiones tienden a hacer que el movimiento electrónico sea aleatorio, ocasionando que el movimiento electrónico general sea de desviación o de arrastre con una velocidad proporcional a la intensidad del campo aplicado, en contraste con una velocidad siempre creciente con aceleración proporcional a la intensidad del campo. Si no hubiese imperfecciones de la red, después de la aplicación de un campo fijo, la corriente electrónica aumentaría con el tiempo hasta alcanzar valores tan grandes que sólo estaría limitada por consideraciones prácticas que no tienen nada que ver con la intensidad del campo o con las propiedades del material. Bajo esas circunstancias, se podría decir que el material tiene resistencia cero (o al menos se diría que no está sujeta a la ley de ohm). De esta manera, la presencia de una resistencia diferente de cero, o conductividad no infinita, se debe a la presencia de imperfecciones de la red. De hecho, se puede ver que la resistencia de un metal aumenta conforme aumentan la temperatura y la concentración de impurezas. De cualquier forma,

el valor de $1/m^*$ que tiene que ver con las propiedades de la red perfecta, afecta los valores de la resistividad o conductividad ya que influencia la ganancia de velocidad promedio entre colisiones con imperfecciones que provocan movimiento aleatorio y que determinan la velocidad de desviación o arrastre.

En situaciones en las que todos los niveles de una banda aislada se encuentran llenos, exceptuando aquellos muy cercanos a la parte más superior, es conveniente pensar en términos de *agujeros* representando la ausencia de electrones en lo que de otra forma sería una banda completamente llena. Como la ausencia de un electrón cargado negativamente es equivalente a la presencia de una carga positiva, los agujeros se comportan como si estuvieran cargados positivamente. Además, como la masa efectiva es negativa para los niveles cercanos a la parte superior de la banda, los agujeros que describen la ausencia de una masa efectiva negativa, se comportan como si tuvieran masa efectiva positiva. En las secciones siguientes se tendrá mas que decir acerca de éllos.

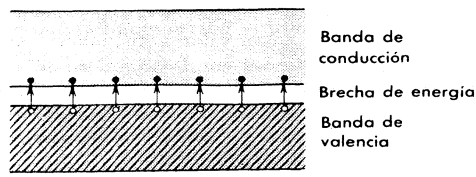
13.8 Semiconductores

Los semiconductores son de gran interés puesto que su comportamiento es la base de muchos dispositivos electrónicos prácticos, tales como los transistores. Asimismo, constituyen ejemplos excelentes de las ideas estudiadas en las secciones anteriores. Los semiconductores son sólidos covalentes que pueden ser considerados como "aislantes" puesto que su banda de valencia se encuentra completamente llena y la banda de conducción completamente vacía a la temperatura de cero absoluto, sin embargo, poseen un intervalo de energías prohibidas entre las bandas de conducción y valencia de no más de aproximadamente 2eV. Para silicio, este intervalo de energías prohibidas es de 1.14 eV y para germanio, el intervalo es de 0.67 eV. A pesar de que el valor de la función de distribución de Fermi que gobierna las poblaciones relativas de un estado de energía en la banda de conducción respecto a un estado de energía en la banda de valencia, es pequeño puesto que $kT \simeq 0.025$ eV a temperatura ambiente, el número de estados disponibles en la banda de conducción es alto. Por lo tanto, la excitación térmica de la banda de valencia a la banda de conducción ocurre para un número significativo de electrones, siendo este número el producto del número de electrones por estado cuántico y el número de estados cuánticos por intervalo de energía. Además, la conductividad de un semiconductor aumenta rápidamente conforme aumenta la temperatura, por ejemplo, el número de electrones excitados en silicio, aumenta por un factor de aproximadamente 10^9 al duplicarse la temperatura de 300°K a 600°K. Como la banda de valencia se encuentra llena a bajas temperaturas, con los cuatro electrones de valencia del silicio o del germanio formando enlaces covalentes, cada excitación electrónica de la banda de conducción deja un agujero en la banda de valencia. Estos agujeros, actuando como portadores de carga positiva, también contribuyen a la conductividad. En la figura 13-12, se muestra el esquema de bandas para un semiconductor.

La conductividad de los semiconductores que resulta de la excitación térmica, se denomina *conductividad intrínseca*. Existen otros modos de estimular la conductividad, tales como la fotoexcitación. El intervalo de energías prohibidas en semiconductores es equivalente a la

FIGURA 13-12

Esquema de bandas para un semiconductor, en el cual el intervalo de energías prohibidas entre la banda de valencia inicialmente llena y la banda de conducción inicialmente vacía, es pequeño. La excitación térmica eleva algunos electrones sobre el intervalo prohibido a la banda de conducción, dejando agujeros en la banda de valencia.



energía de fotones en la región roja o infrarroja del espectro electromagnético, de modo que los semiconductores son *fotoconductores*. Esta contribución a la conductividad aumenta con la intensidad de la luz y se hará cero, cuando la fuente de luz se apague y se restaura la distribución térmica normal de los electrones en equilibrio. Otra forma de aumentar la conductividad es agregar impurezas al semiconductor. Es decir, se reemplazan algunos átomos del semiconductor con átomos de otro elemento que tengan aproximadamente el mismo tamaño, pero valencia diferente. La conductividad resultante, cuyo origen se analizará aquí, se denomina *conductividad extrínseca*, y el procedimiento se llama *envenenamiento*.

Si se agrega una pequeña cantidad de arsénico al germanio fundido, las impurezas del arsénico cristalizarán con el germanio en su estructura similar al diamante. El arsénico tiene cinco electrones por átomo, en la banda de valencia, y el germanio tiene cuatro electrones por átomo en la banda de valencia. Por lo tanto, cuatro de los electrones del arsénico se utilizan para formar enlaces covalentes y el quinto electrón es casi libre. No puede entrar en la banda de valencia llena y se encuentra débilmente ligado en una "órbita" de radio muy grande en torno al ion monovalente de arsénico. La atracción de Coulomb del ion de arsénico se encuentra, en gran parte, apantallada por la polarización de los átomos de germanio que intervienen, es decir, el campo debido al ion, se debilita por la naturaleza dieléctrica del cristal de germanio. Debido a que este quinto electrón tiene una energía de enlace tan pequeña con el arsénico se puede ionizar y pasar a la banda de conducción a una temperatura mucho menor de la que sería necesaria para los electrones de la banda de valencia. Por lo tanto, este electrón en exceso, ocupará alguno de un conjunto discreto de niveles de energía ligeramente por debajo de la banda de conducción a temperaturas bajas, pero fácilmente se puede excitar térmicamente esa banda. A temperaturas comunes, todos estos electrones en exceso pasan a la banda de conducción. La conductividad eléctrica se puede controlar por medio de la cantidad de arsénico utilizado como impureza. Para obtener un efecto significativo se necesita tan sólo un átomo de impureza por millón de átomos del semiconductor. Una impureza que cede electrones se le llama impureza *donante* y el semiconductor resultante es llamado *tipo* $-n$ (negativo) ya que posee un exceso de electrones libres.

Ejemplo 13-3. Hacer una estimación a grosso modo de la energía de enlace del electrón donante del arsénico en un cristal de germanio, tomando el valor de la constante dieléctrica del cristal como $\kappa = 16$ y el valor de la masa efectiva del electrón como $m^* = 0.2m$.

El electrón donante se mueve en el campo del ion de arsénico, As^+, y se comporta como el electrón del estado base de un átomo similar al hidrógeno. La diferencia principal está en que este átomo se mueve en una red polarizable en lugar de en el vacío. Debido a que la energía potencial del sistema ion-electrón es ahora $-e^2/\kappa 4\pi\epsilon_0 r$, los niveles de energía tipo hidrógeno correspondientes, se obtienen sustituyendo $4\pi\epsilon_0$ por $\kappa 4\pi\epsilon_0$ en la fórmula (4-18) para los niveles de energía del hidrógeno, sustituyendo también la masa m que se encuentra en aquel caso, por la masa efectiva m^* para tomar en cuenta el hecho de que el electrón se encuentra realmente en una red cristalina. Como el electrón se encuentra cerca de un extremo inferior de la banda, donde $d^2\mathscr{E}/dk^2$ es grande, m^* es pequeña; varias evidencias indican que el valor de $m^* \simeq 0.2m$.

Por lo tanto, se tiene que:

$$E \simeq -\frac{1}{\kappa^2}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

donde $\kappa = 16$, $m^* = 0.2m$, y $n = 1$. Como para $\kappa = 1$ y $m^* = m$ la energía E tiene el valor de -13.6 eV, es fácil demostrar que

$$E \simeq -0.01 \text{ eV}$$

Por lo tanto, de acuerdo con esta estimación la energía necesaria para ionizar el electrón donante del arsénico en un cristal de germanio y llevarlo al fondo de la banda de conducción es de aproximadamente 0.01 eV. El valor obtenido directamente de medidas de la energía de fotones necesaria para ionizar, o

TABLA 13-2. Energías de ionización de donantes y aceptantes.

	En germanio	En silicio
Impureza	$\mathscr{E}_c - \mathscr{E}_{\text{donante}}$ (eV)	
Arsénico	0.0127	0.049
Antimonio	0.0096	0.039
Impureza	$\mathscr{E}_{\text{aceptante}} - \mathscr{E}_v$ (eV)	
Galio	0.0108	0.065
Indio	0.0112	0.16

indirectamente de medidas de la dependencia con la temperatura de la conductividad, es 0.0127 eV. Ver la tabla 13-2 para los valores medidos en otros casos.

Obsérvese que el radio de la órbita tipo Bohr del electrón donante es $\kappa m/m^* \simeq 80$ veces la correspondiente al estado base del átomo de hidrógeno, como puede verse al analizar (4-16). Así pues, el electrón se mueve en una órbita que contiene un gran número de átomos de germanio. Esto justifica el que en la estimación anterior se utilizara la constante dieléctrica, que es una cantidad macroscópica en lugar de microscópica, que caracteriza al cristal de germanio cuando éste es considerado como un continuo. ◀

Si se agrega una pequeña cantidad de galio al germanio, la situación será diferente a lo que se acaba de estudiar. El galio tiene 3 electrones por átomo en la banda de valencia, de modo que tiene una deficiencia de un electrón por átomo en la formación de enlaces covalentes. El resultado es un agujero que puede moverse aleatoriamente por el cristal, comportándose como una carga y masa positivas a medida que los electrones llenan un agujero y crean otro. Desde un punto de vista energético, esta impureza introduce niveles discretos vacíos, ligeramente por encima de la parte superior de la banda de valencia. Entonces, los electrones de valencia se pueden excitar fácilmente a estos niveles de impureza que a su vez pueden aceptarlos, dejando agujeros en la banda de valencia. La separación en energía entre los niveles aceptantes y la parte superior de la banda de valencia es pequeña, por la misma razón que se obtiene una separación pequeña entre los niveles donantes y el fondo de la banda de conducción: una constante dieléctrica alta y una masa efectiva pequeña. Una impureza deficiente en electrones se denomina *aceptante* y el semiconductor resultante se le llama *tipo - p* (positivo).

Por medio del efecto Hall, se puede determinar si la conductividad de un semiconductor es tipo-p o tipo-n. En la figura 13-13, se muestra esquemáticamente el diagrama de niveles de energía correspondiente a cada tipo. Los niveles de energía localizados de átomos de impureza no se ensanchan para formar bandas, ya que los átomos se encuentran separados por muchos parámetros de la red interactuando entre sí, muy débilmente. En la tabla 13-2 se presentan las energías de los niveles que introducen pequeñas cantidades de impurezas comunes en cristales de germanio y silicio. Para el caso de impurezas donantes, se da la energía de los niveles donantes a la energía $\mathscr{E}_c$ del fondo de la banda de conducción, mientras que para impurezas aceptantes, se da la energía de la parte superior de la banda de valencia, $\mathscr{E}_v$ a los niveles aceptantes. Nótese que, a temperatura ambiente, estas energías son comparables con $kT = 0.025$ eV. Por lo tanto, se puede esperar una gran cantidad de ionización térmica a la temperatura ambiente.

En un semiconductor intrínseco, el número de estados vacíos en la banda de valencia, es igual al número de estados ocupados en la banda de conducción, de modo que la energía de Fermi se localiza en alguna parte del intervalo de energías prohibidas entre las bandas. Si la densidad de estados en las dos bandas es simétrica, entonces la energía de Fermi se encontrará en medio del

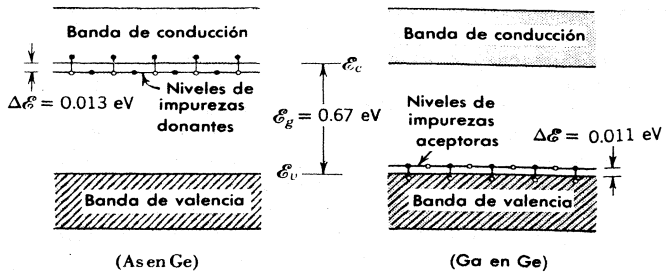


FIGURA 13-13

Izquierda: Diagrama esquemático de niveles de energía de un cristal de germanio que contiene átomos de impurezas donantes. *Derecha:* Conteniendo átomos de impurezas aceptantes.

intervalo de energías prohibidas. La energía de Fermi, como el estudiante recordará, se define como la energía para la cual el número promedio de electrones que ocuparían dicho estado cuántico es 0.5, donde el spin electrónico se trata de manera tal que la ocupación máxima es 1.0.

Ejemplo 13-4. Considérese una banda prohibida de anchura $\mathscr{E}_g$ que separa una banda de valencia y una banda de coducción simétrica vacía, en un semiconductor intrínseco. Demostrar que la energía de Fermi se encuentra en el centro de la banda prohibida, es decir, que $\mathscr{E}_F = \mathscr{E}_g/2$ si $\mathscr{E} = 0$ se toma como el extremo superior de la banda de valencia.

Se puede continuar con la demostración examinando la figura (13-14) en la parte de arriba. En la figura se graficó $N(\mathscr{E})$, o sea, el número de estados cuánticos por intervalo unitario de energía, para la parte superior de la banda de valencia y la parte inferior de la banda de conducción. En la figura, la energía de Fermi, $\mathscr{E}_F$ se coloca tentativamente en el centro del intervalo de anchura $\mathscr{E}_g$ entre las dos bandas. La densidad de estados $N(\mathscr{E})$ se traza de modo que su comportamiento descendente al dirigirse a la parte

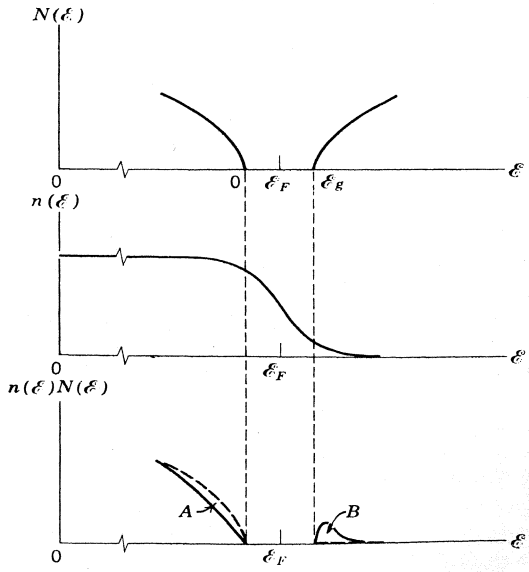


FIGURA 13-14

Número de electrones como función de la energía en las bandas de valencia y conducción para un aislante o semiconductor cuya banda prohibida tiene una anchura $\mathscr{E}_g$, expresado como el producto de la densidad de estados $N(\mathscr{E})$ y la distribución de Fermi $n(\mathscr{E})$.

superior de la banda de valencia, sea simétrico a su comportamiento ascendente al alejarse del fondo de la banda de conducción. Lo anterior se encuentra en concordancia cualitativa con el comportamiento general de $N(\mathscr{E})$ a lo largo de toda una banda aislada (ver, por ejemplo, la figura 13-5).

En la parte media de la figura 13-14, se muestra la función de distribución de Fermi $n(\mathscr{E})$, que es el número probable de electrones por estado. Para mayor claridad, se constituye una temperatura de operación donde $kT \sim \mathscr{E}_g$. También se construye para $\mathscr{E}_F$ en el centro de la banda prohibida.

La curva continua en la parte inferior de la figura 13-14, muestra el producto $n(\mathscr{E})\,N(\mathscr{E})$, que proporciona el número de electrones por unidad de energía en varios estados a la temperatura antes mencionada. La curva discontinua, muestra la misma cosa pero a la temperatura de cero absoluto. A $T=0$, los estados de valencia se encuentran totalmente llenos y los estados de conducción, completamente vacíos, de modo que la curva discontinua en la región de valencia es $N(\mathscr{E})$, mientras que es el eje $\mathscr{E}$ en la región de conducción. El área A que se encuentra entre las curvas discontinua y continua es proporcional al número de estados de valencia que deja el electrón cuando la temperatura aumenta; es decir, es una medida del número de espacios vacíos creados. El área B, entre las curvas continua y discontinua es proporcional al número de electrones que son promovidos a estados en la banda de conducción a la temperatura de operación.

En un semiconductor intrínseco, es necesario que el área A sea igual al área B, ya que la densidad de agujeros en la banda de valencia, es igual a la densidad de electrones en la banda de conducción. Es evidente que esta condición se satisface en la figura 13-14, ya que se construyó con $\mathscr{E}_F$ en el centro de la banda prohibida. El estudiante podrá ver rápidamente que esto no se satisface si $\mathscr{E}_F$ se escoge de otra manera, debido a la simetría de $n(\mathscr{E})$ respecto a $\mathscr{E}_F$, y a la simetría (aproximada) de $N(\mathscr{E})$ respecto al centro del intervalo de energías prohibidas que se encuentra entre las dos bandas permitidas. ◀

Ejemplo 13-5. Hacer una estimación del número relativo de electrones en la banda de conducción a un aislante o semiconductor a temperatura T.

La figura 13-14 también muestra una imagen exagerada de la distribución de energías de los electrones como un producto de la densidad de estados $N(\mathscr{E})$ y la distribución de Fermi $n(\mathscr{E})$ que sea apropiada en las bandas de valencia, prohibidas y de conducción de un aislante. Si, en lugar de la distribución de Fermi $n(\mathscr{E})$, se tiene $\mathscr{E} - \mathscr{E}_F \gg kT$, entonces:

$$n(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{(\mathscr{E}-\mathscr{E}_F)/kT} + 1} \simeq \frac{1}{e^{(\mathscr{E}-\mathscr{E}_F)/kT}}$$

de modo que en ese intervalo de energías, la distribución de Fermi varía con la energía, como la distribución de Boltzmann. Del ejemplo 13-4, se sabe que $\mathscr{E} - \mathscr{E}_F = \mathscr{E}_g/2$ en el fondo de la banda de conducción de un aislante, si $\mathscr{E}$ se mide de la parte superior de la banda de valencia. Entonces, como $\mathscr{E}_g \gg kT$ para un aislante, entonces se cumple la condición $\mathscr{E} - \mathscr{E}_F \gg kT$. Por lo tanto, se puede tomar

$$n(\mathscr{E}) = \frac{1}{e^{\mathscr{E}_g/2kT}} = e^{-\mathscr{E}_g/2kT}$$

como el número de electrones por estado en la banda de conducción de un aislante.

La distribución de Fermi decae en su valor por un orden de magnitud, en un intervalo de energías de aproximadamente $\Delta\mathscr{E} = 2kT$ de modo que se puede obtener una buena estimación de $\Delta\mathscr{N}$, el número de electrones de conducción, calculando los que se encuentran en un intervalo de $2kT$ por encima del fondo de la banda de conducción. Ahora bien, como $\Delta\mathscr{N} = n(\mathscr{E})N(\mathscr{E})\,\Delta\mathscr{E}$ enseguida debe evaluarse $N(\mathscr{E})$, la densidad de estados. Dado que $N(\mathscr{E})$ empieza en cero, en el fondo de la banda de conducción, se obtiene un buen valor promedio sobre el intervalo $\Delta\mathscr{E} = 2kT$, evaluando $N(\mathscr{E})$ cuando $\mathscr{E} = kT$. Por tanto,

$$\Delta\mathscr{N} = n(\mathscr{E})N(\mathscr{E})\,\Delta\mathscr{E} = e^{-\mathscr{E}_g/2kT}N(kT)2kT$$

Se utilizarán aquí los resultados $\mathscr{N} = (2/3)\mathscr{E}_F N(\mathscr{E}_F)$ del ejemplo 13-2 para un metal como una estimación del número total de electrones. De (13-14) también se puede notar que $N(kT)/N(\mathscr{E}_F) = (kT/\mathscr{E}_F)^{1/2}$, de modo que se obtiene

$$\frac{\Delta\mathscr{N}}{\mathscr{N}} \simeq \frac{e^{-\mathscr{E}_g/2kT}N(kT)2kT}{(2/3)\mathscr{E}_F N(\mathscr{E}_F)} = 3e^{-\mathscr{E}_g/2kT}\left(\frac{kT}{\mathscr{E}_F}\right)\left(\frac{kT}{\mathscr{E}_F}\right)^{1/2}$$

o bien,

$$\frac{\Delta \mathcal{N}}{\mathcal{N}} \simeq \left(\frac{kT}{\mathscr{E}_F}\right)^{3/2} e^{-\mathscr{E}_g/2kT}$$

Este el número relativo de electrones de conducción para un aislante.

Esta fracción, es mucho menor que el resultado correspondiente $kT/\mathscr{E}_F$ del ejemplo 13-2 para un metal en parte, porque la densidad de estados $N(\mathscr{E})$ es más pequeña cerca del fondo de la banda de conducción en un aislante que a la energía de Fermi en un metal, pero principalmente por el factor de ocupación $e^{-\mathscr{E}_g/2kT}$. Si se toma $\mathscr{E}_g = 6$ eV como el intervalo de energías prohibidas en un aislante típico, de modo que a la temperatura ambiente este factor es $e^{-\mathscr{E}_g/2kT} = e^{-150} = 10^{-65}$. La fracción $\Delta\mathcal{N}/\mathcal{N}$ no sólo es insignificante, sino que el número absoluto de electrones de conducción también es despreciable para un aislante. Sin embargo, si $\mathscr{E}_g = 1$ eV, como en un semiconductor, entonces, a pesar de que $e^{-\mathscr{E}_g/2kT} = e^{-25} = 10^{-11}$ es una fracción muy pequeña, el número de electrones de conducción ya no es insignificante. ◀

En un semiconductor con impurezas donantes, la energía de Fermi queda por arriba de la mitad de la banda prohibida, ya que hay más electrones en la banda de conducción que agujeros en la banda de valencia. En un semiconductor con impurezas aceptantes, la energía de Fermi se encontrará por abajo de la mitad de la banda prohibida ya que habrá menos electrones en la banda de conducción que agujeros en la banda de valencia. Resulta instructivo considerar los efectos de las impurezas y la temperatura sobre la energía de Fermi, Se empezará a la temperatura de cero absoluto en un semiconductor tipo-n. Los niveles donantes se encuentran todos ocupados pero no hay electrones en la banda de conducción. La energía de Fermi deberá estar entre los niveles donantes y el fondo de la banda de conducción, ya que el número de electrones por estado $n(\mathscr{E})$ es uno, hasta e incluyendo los niveles donantes y cero en la banda de conducción. Ahora bien, a medida que se aumenta la temperatura, los electrones pueden elevarse de los niveles donantes a la banda de conducción. A esa temperatura, a la cual la mitad de los estados donantes se encuentran vacíos, la energía de Fermi corresponde a la energía del nivel donante. Con un aumento aún mayor en la temperatura, los electrones de la banda de valencia se excitan y la energía de Fermi baja aún más. Cuando el número de electrones en la banda de valencia es una fracción muy grande de los que se encuentran en la banda de conducción, el semiconductor actúa como si fuera intrínseco y la energía de Fermi baja a casi el centro de la banda prohibida. Si se hubiera empezado con un semiconductor tipo-p, se habría encontrado, de manera similar, que al aumentar la temperatura, la energía de Fermi se mueve de la parte superior de la banda de valencia y los niveles aceptantes al cero absoluto, a la mitad de la banda prohibida a altas temperaturas. A bajas temperaturas, donde $kT \ll \mathscr{E}_g$, la conducción

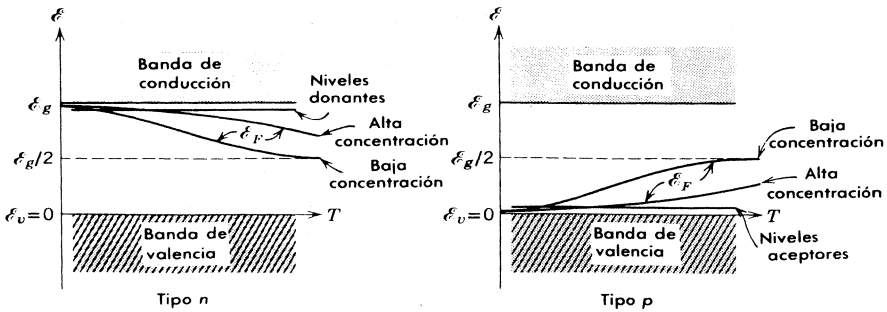


FIGURA 13-15

Izquierda: La energía de Fermi como función de la temperatura, para un semiconductor tipo-n con dos concentraciones de impurezas diferentes. *Derecha:* Para un semiconductor tipo-p con dos concentraciones de impurezas diferentes.

se debe básicamente a impurezas, ya que no hay mucha excitación de electrones de valencia. A altas temperaturas, se han usado los niveles de impureza, es decir, habrán: o donado, o aceptado electrones, así que el semiconductor actúa como si fuera intrínseco. En la figura 13-15 se grafica la energía de Fermi como función de la temperatura para semiconductores con impurezas.

13.9 Dispositivos semiconductores

Se mostrará el uso de semiconductores con impurezas en electrónica, analizando brevemente la operación de 3 dispositivos semiconductores, el rectificador, el transistor y el diodo túnel.

Un *rectificador* se forma si se tienen impurezas aceptantes (tipo-p) en una región del cristal e impurezas donantes (tipo-n) en otra región. A la frontera entre estas dos regiones se le denomina *unión p-n*. En la figura 13-6 se muestra el diagrama de bandas de energía de una unión *p-n* sin polarización a la temperatura ambiente. Las fronteras de las bandas deberán doblarse al ir de la región *p* y pasar por la junta a la región *n*, ya que la energía de Fermi se encuentra cerca de la parte superior de la banda de valencia en la región *p* y cerca del fondo de la banda de conducción en la región *n*, sin embargo, el nivel de Fermi deberá tener el mismo en todos lados. La razón se encuentra en que si la energía de Fermi no fuera la misma en ambas regiones, la energía del sistema no se minimizaría. Podría reducirse por el flujo de electrones de una región a estados desocupados de menor energía en otra región y por lo tanto el sistema no estaría en equilibrio. En la realidad, sí se produciría un flujo considerable de electrones al establecerse el equilibrio cuando inicialmente se ponen en contacto las regiones *p* y *n*. Esto conduce a una acumulación de electrones en la región *p* de la unión, o una acumulación de agujeros en el lado *n* de la unión. Por lo tanto, la región de la unión presenta similaridades con un condensador de placas paralelas con una carga negativa del lado *p* y una carga positiva del lado *n*, como se

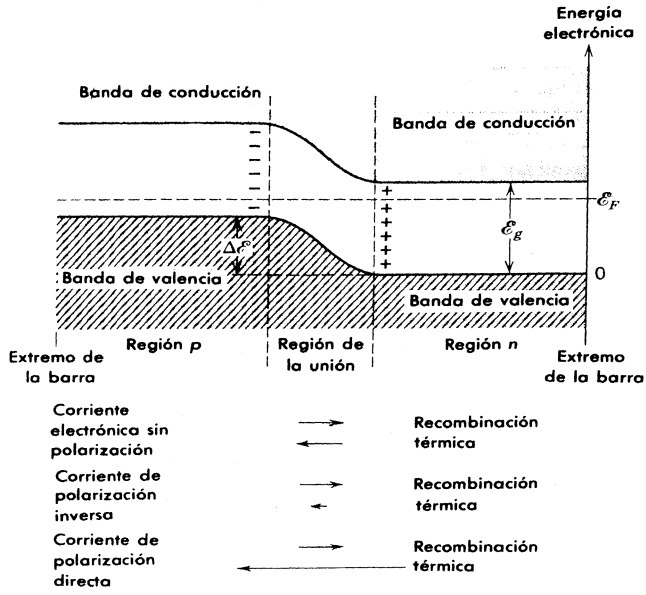


FIGURA 13-16
Diagrama de niveles de energía electrónicos para una unión p-n no polarizada.

muestra en la figura. Si un electrón se mueve a través del campo eléctrico producido dentro de esta capa dipolar, su energía aumentará al pasar del lado *n* al lado *p*. Esto se refleja en la forma como se desplazan hacia arriba los niveles de energía en la parte superior de la banda de valencia y en el fondo de la banda de conducción, al pasar por la región de la unión.

Aún después de que se establece el equilibrio, existe un flujo de electrones en ambas direcciones a través de la junta. Por una parte, cada cierto tiempo, la excitación térmica puede ocasionar que un electrón salte a la banda de conducción de la región *p* (dejando un agujero más en la banda de valencia). Entonces, el electrón puede moverse libremente hacia la región de la unión, para después ser acelerado hacia la región *n* por la barrera de potencial en esa región constituyendo parte de lo que se denomina la *corriente térmica*. Asimismo, un electrón en la banda de conducción de la región *n*, con energía ligeramente por debajo de la banda de conducción en la región *p*, puede ganar muy poca energía extra en una fluctuación y ser capaz de moverse hacia la región *p*. Allí se puede volver a combinar con uno de los muchos agujeros de la región *p*. Ese electrón es parte de la llamada *corriente de recombinación*. Debe existir una corriente tal, porque en equilibrio la corriente térmica se debe balancear, de modo que no exista una corriente neta a través de la unión.

Considérese ahora una fuente de voltaje externa y aplicada a través de los extremos del dispositivo, con el voltaje negativo aplicado a la región *p*, y el voltaje positivo aplicado a la región *n*. Esto aumentará la energía de todos los electrones en la región *p*, y disminuirá la energía de los de la región *n*, aumentando la barrera de potencial entre las dos regiones en ese proceso. Como la región de la unión ya ha sido agotada en sus portadores de carga, su resistencia es relativamente grande y la mayor parte de la caída de voltaje debida al voltaje aplicado, ocurre a través de la unión. Como la cantidad de corriente térmica depende de la temperatura y de la anchura de la banda prohibida entre las bandas de valencia y conducción, ninguna de las cuales se modifica por la aplicación del voltaje, no se alterará la corriente térmica. Sin embargo, la corriente de recombinación disminuirá por un factor grande, porque la altura de la barrera de potencial será más alta, de modo que ahora sólo aquellos pocos electrones en la cola decreciente de la distribución de Fermi de la banda de conducción en la región *n*, tienen oportunidad de moverse hacia la banda de conducción de la región *p*. El efecto neto será un flujo pequeño de electrones en la dirección de la región *p* a la *n*, debido a la corriente térmica no balanceada. Desde luego, este flujo de corriente térmica es en la dirección que se esperaría dado el voltaje aplicado. Se trata de la pequeña *corriente de polarización inversa* indicada por las flechas en el fondo de la figura 13-16.

El rectificador de unión recibe una *polarización directa* al aplicarse un voltaje positivo a la región *p* y un voltaje negativo a la región *n*. Esto disminuye la altura de la barrera de potencial entre las dos regiones. Una vez más, no existe un efecto apreciable en la corriente térmica, pero la corriente de recombinación aumenta en un factor grande. De pronto, todos electrones que se encuentran cerca de $\mathscr{E}_F$, en la distribución de Fermi de la región *n*, tienen energía suficiente para pasar a través de la unión a la banda de conducción de la región *p*, porque el fondo de la banda de conducción ha bajado su energía. Estos electrones no responden instantáneamente a la aplicación de una polarización directa, sino que se difunden a la región *p* de modo muy similar a la forma como las moléculas de un gas se difunden a una región de menor densidad que repentinamente se vuelve accesible a ellas. La corriente electrónica neta en un rectificador con polarización directa, fluye en la dirección de la corriente electrónica de recombinación, como se indica en la parte inferior de la figura (13-16). La unión es un rectificador, porque la magnitud de la corriente de polarización directa, es mucho mayor que la magnitud de la corriente de polarización inversa, dada una magnitud del voltaje de polarización. La razón es que la corriente de polarización inversa esta limitada por el valor pequeño de la corriente térmica, mientras que la corriente de polarización directa se vuelve muy grande, a medida que disminuye la altura de la barrera de potencial aumentando la polarización directa. La resistencia al flujo de corriente en el caso de polarización inversa, es típicamente más grande que la resistencia en caso de polarización directa por cuatro o cinco órdenes de magnitud. Obsérvese que esta explicación ha

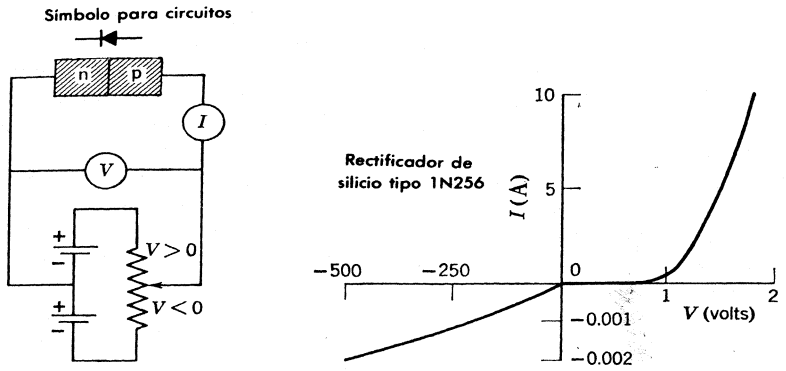


FIGURA 13-17

Izquierda: Circuito en el cual se pueden variar el voltaje a través de la unión p-n. El voltaje se toma como positivo, cuando el lado p se encuentra a un potencial más alto. *Derecha:* Corriente a través de la unión como función del voltaje aplicado. Obsérvese que las escalas utilizadas para las porciones de la curva correspondientes a polarización directa y polarización inversa son muy diferentes.

sido expresada en términos de flujo de electrones. Del mismo modo pudo haberse hecho en términos del flujo de agujeros; ambos procesos ocurren, dando como resultado las mismas propiedades de rectificación de la unión.

Un rectificador semiconductor, presenta muchas ventajas respecto de un diodo rectificador de tubo al vacío (bulbo), incluyendo una vida más larga y un tamaño mucho menor. Como en un diodo, la unión *p-n* es un elemento no óhmico, la relación voltaje corriente es no lineal, como se muestra en la figura 13-17. Sin embargo, a diferencia con el tubo al vacío, no hay necesidad de un filamento consumidor de potencia en el dispositivo semiconductor, de forma que su eficiencia es mayor.

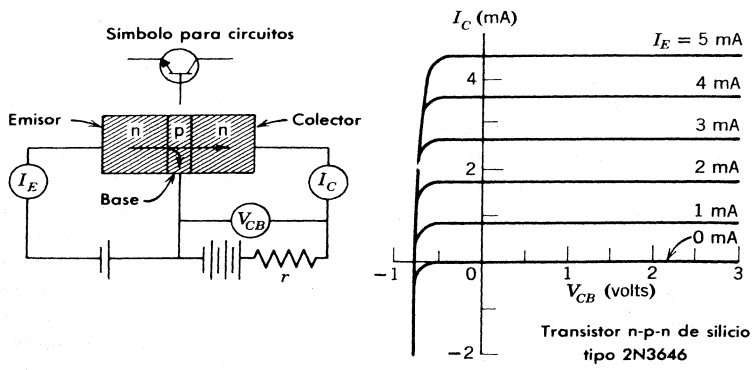


FIGURA 13-18

Izquierda: Circuito en el cual un transistor n-p-n actúa como amplificador de potencia. El flujo de electrones es en la dirección señalada por la flecha; del emisor al colector. *Derecha:* Curvas características para un transistor actuando como amplificador de potencia.

Un *transistor* se puede considerar como una combinación de dos uniones rectificadores semiconductoras, como una combinación p-n-p o una n-p-n. En la figura 13-18 se muestra un circuito que presenta el comportamiento de un transistor. Las regiones n-p-n se les llama *emisor, base* y *colector,* respectivamente. La conexión *emisor-base* se encuentra directamente polarizada, de modo que la resistencia al flujo de corriente es pequeña en esta parte del circuito. La conexión base-colector se encuentra polarizada en la dirección inversa, así que en esa parte por lo general hay mayor resistencia al flujo de corriente. Sin embargo, al aplicarse un voltaje en el circuito emisor de modo que se establezca allí una corriente, los electrones que llegan a la región de la base (que es muy delgada y de menor conductividad que el emisor) son atraídos por la diferencia de potencial entre la base y el colector. Por lo tanto, habrá una corriente en el circuito del colector. (Debido a que el emisor tiene una mayor conductividad que la base, la mayor parte de la corriente a través de la unión emisor base, se lleva por los electrones que se mueven del emisor a la base, en lugar de agujeros que se mueven de la base al emisor).

La idea básica en la acción de un transistor, es que la corriente en el circuito emisor controla la corriente en el circuito del colector. Más del 90% de la corriente que pasa por el emisor, pasa por el colector, de modo que las corrientes son de magnitudes similares. Sin embargo, el voltaje a través de la conexión base-colector puede ser mucho mayor que el correspondiente a través de la conexión emisor-base, ya que el anterior está inversamente polarizado, de modo que la salida de potencia en el circuito del colector puede ser mucho mayor que la entrada de potencia en el circuito del emisor. Por lo tanto, el transistor actúa como un amplificador de potencia. En la figura 13-18, se muestran curvas características de corriente contra voltaje. Otras conexiones del circuito hacen el transistor un dispositivo muy útil como amplificador de corriente o de voltaje.

Un *diodo túnel* es un dispositivo semiconductor que utiliza el fenómeno de penetración de barrera, estudiado en la sección 6-5. Puede considerarse como una junta p-n hecha con semiconductores de muy alta concentración de impurezas. En la figura 13-19*a* se grafica la energía del electrón a través de una junta no polarizada. Las bandas son similares a las que se muestran en la figura 13-16, excepto que (1) habiendo una mayor concentración de impurezas, la unión es más angosta, ya que entonces una longitud más pequeña del semiconductor contiene suficientes portadores de carga para producir la requerida capa dipolar a través de la unión, y (2) los niveles donantes y aceptantes en el material tipo p y tipo n ya no estarán bien definidos, sino que se volverán bandas anchas que traslapan las bandas de valencia y conducción, ya que los niveles donantes y también los aceptantes, se encuentran tan próximos entre sí, que interactúan. Por lo tanto, la energía de Fermi se mueve hacia arriba dentro de la banda de conducción en el lado n, y hacia abajo dentro de la banda de valencia del lado p.

Debido a que la unión es angosta ($\sim 10^{-8}$ m), los electrones pueden atravesar la banda prohibida en la unión, por un proceso que, en todos aspectos es similar a la penetración de barrera. Por ejemplo, la eigenfunción que describe a un electrón que, por proceso túnel, atraviesa la banda prohibida, tiene la misma forma exponencial que la eigenfunción de un electrón que por el mismo proceso, atraviesa una barrera. En equilibrio, como se muestra en la figura 13-19*a*, la rapidez con que un electrón efectúa el proceso túnel a través de la barrera, es igual en ambas direcciones.

Si enseguida se aplica un voltaje externo pequeño a través de los extremos de la barra con polarización directa, el proceso túnel del lado-n al lado p aumenta, ya que existen estados de energía permitidos del lado p de la banda de valencia, mientras que el proceso túnel de electrones en sentido contrario disminuye. Por lo tanto, como se muestra en la figura 13-19b, existe un flujo neto de corriente a través de la unión. A medida que el voltaje aplicado continúa creciendo, la corriente neta disminuye, ya que el número de estados vacíos disponibles para el electrón que realiza el efecto túnel, disminuyen. En la figura 13-19*c*, la corriente neta se reduce casi a cero ya que los electrones en el material tipo-n no encuentran estados de energía disponibles de los cuales fluir. Con un voltaje aplicado aún mayor, la corriente electrónica se vuelve la característica de una unión p-n normal. Es decir, los electrones fluyen por la junta sin

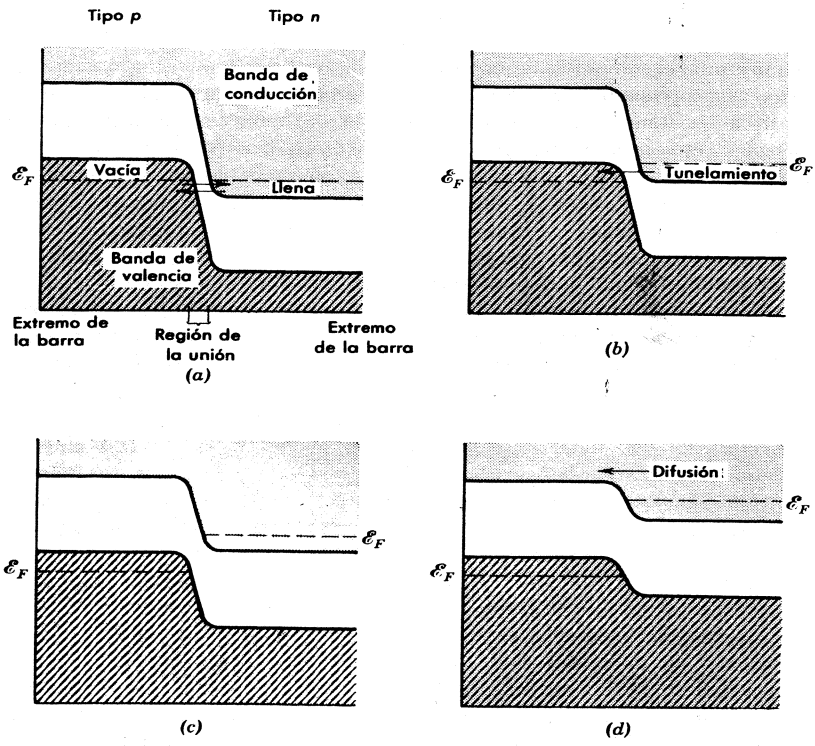


FIGURA 13-19

Diagramas de niveles de energía electrónicos para una unión tipo-n y las regiones tipo-p de un diodo túnel. En (a) el diodo no está polarizado. En (b) se aplica un voltaje pequeño entre los extremos del dispositivo, siendo positivo el extremo tipo-p. En (c) y (d) el voltaje se va aumentando progresivamente. Las flechas indican el flujo de electrones a través de la unión entre las dos regiones.

efecto túnel, a estados de energía permitidos en la banda de conducción del material de las bandas, disminuye, haciendo posible que los electrones puedan difundirse a través de la unión a la banda de conducción de la región p. Este proceso se indica en la figura 13-19*d*.

En la figura 13-20, se muestra la curva característica de corriente en función del voltaje para un diodo túnel típico. Las letras que señalan puntos en la curva corresponden a los cuatro voltajes aplicados de la figura anterior. En la región entre los puntos *b* y *c*, la pendiente de la curva dI/dV, es negativa y el diodo túnel tiene una resistencia *negativa*, ya que la corriente disminuye conforme aumenta el voltaje aplicado. Esta característica los hace particularmente útiles en los circuitos interruptores de las computadoras.

La ventaja más grande que tiene un diodo túnel, es su rápido tiempo de respuesta cuando opera en la región *a* — *c*. El flujo de corriente en otros tipos de diodos y transistores semiconductores, siempre depende del proceso de difusión. Como la razón de difusión puede cambiar tan rápidamente como cambia la distribución de portadores de carga, estos dispositivos presentan una respuesta relativamente lenta, (más lenta que tubos de vacío) y es difícil su utilización a altas frecuencias. Sin embargo, la razón de tunelamiento puede cambiar, tan rápido como pueden cambiar las bandas de energía por el voltaje aplicado y ésta es una limitación

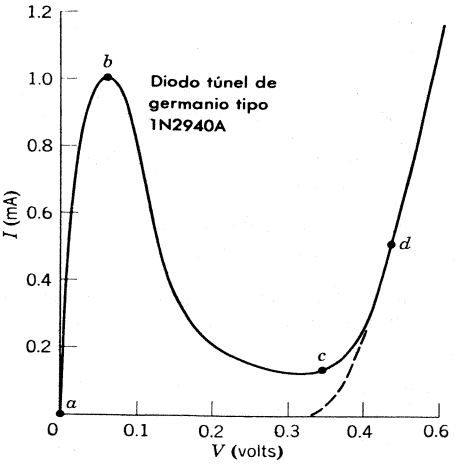


FIGURA 13-20
Corriente que fluye a través de un diodo túnel como función de la diferencia de potencial aplicado. Los puntos denotados por letras, corresponden a los cuatro voltajes aplicados de la figura 13-19. Obsérvese que la resistencia del diodo es negativa para los voltajes aplicados entre *b* y *c*. La línea discontinua indica la corriente característica si no hubiera tunelamiento, es decir, como en una unión rectificadora común de germanio.

mucho menos seria. Los diodos túnel han sido utilizados como osciladores a frecuencias mayores que 10^{11} Hz, y como circuitos interruptores que operan a tiempos menores que 10^{-9} seg.

PREGUNTAS

1. En el texto, el estado sólido se contrasta con el estado gaseoso en términos de interacciones atómicas (ó moleculares). En estos términos, ¿cómo podría caracterizarse el estado líquido?

2. Explicar la afirmación de que el principio de exclusión impide que los sólidos se colapsen a volumen cero.

3. ¿Existe alguna analogía entre el desdoblamiento de un nivel de energía cuando dos átomos se aproximan entre sí para formar una molécula y el desdoblamiento de las frecuencias de resonancia a medida que dos circuitos eléctricos resonantes se acoplan? ¿Por qué?

4. Muy a menudo se afirma que un cristal es una molécula gigante. Explicar. ¿Puede una molécula diatómica considerarse como un sólido pequeño?

5. ¿Por qué el enlace metálico ocurre generalmente con átomos que tienen un pequeño número de electrones de valencia?

6. Considerando que sus estructuras electrónicas son similares, ¿por qué el litio es un metal y el hidrógeno un sólido molecular?

7. Explicar por qué el enlace metálico conduce a un arreglo compacto de los átomos; es decir, explicar por qué en el enlace metálico, la energía más baja corresponde a la mayor densidad numérica de átomos.

8. ¿Por qué la mayoría de los sólidos metálicos son opacos, los sólidos covalentes algunas veces opacos y los sólidos iónicos casi nunca opacos a la radiación visible?

9. De los cuatro tipos de enlace estudiados en el texto, ¿cuál o cuáles son los que más probablemente producirían un aislante? ¿Un conductor? ¿Un semiconductor?

10. Justificar la afirmación de que (13-1*a*) reune los requisitos de que un material está sujeto a la ley de Ohm.

11. ¿Cuáles son los mecanismos que dan cuenta de la resistividad ordinaria de los metales? ¿Cuáles son los que dependen de la temperatura?

12. ¿Cómo contribuyen los electrones a la conductividad térmica? Como portadores de energía calorífica, ¿son los electrones mejores que las vibraciones de la red?

13. Explicar por qué la conductividad eléctrica de los materiales varía en un factor de 10^{24} mientras que la conductividad térmica de los materiales sólo varía en un factor de aproximadamente 10^{8}.

14. Explicar por qué el llenado secuencial de agujeros por electrones es equivalente a una corriente positiva. ¿Podría considerarse este proceso como una corriente de electrones?

15. ¿Cómo se relaciona el resultado del ejemplo 13-2, que trata de la fracción de electrones de conducción que pueden ser térmicamente excitados, con los calores específicos de los metales a altas temperaturas?

16. El ejemplo 13-2 implica que solo $\Delta\mathcal{N}/\mathcal{N}$ de los electrones libres toman parte en la conducción de electricidad, mientras que algunos experimentos, tales como el efecto Hall, indican que los $\mathcal{N}$ electrones toman parte. Explicar.

17. Explicar por qué una masa efectiva negativa no conduce a una violación de la ley de movimiento de Newton.

18. ¿Cómo se relaciona la trasparencia de un semiconductor con el intervalo de energías de la banda prohibida?

19. ¿Qué otros elementos, aparte de arsénico y el antimonio se pueden utilizar en el germanio como impurezas para formar un semiconductor tipo-n? ¿Qué otros elementos, aparte de indio y galio, se pueden utilizar para formar un semiconductor tipo-p?

20. ¿El bombardeo electrónico podría afectar la conductividad eléctrica de un semiconductor? ¿El bombardeo de otras partículas?

21. ¿Qué efecto tiene un campo eléctrico aplicado sobre un aislante?

22. Experimentalmente se encuentra que la adición de impurezas a metales aumenta su resistividad, sin embargo, la adición de impurezas a semiconductores disminuye su resistividad. Explicar. Empero, muchos aislantes son muy impuros; ¿por qué las impurezas no afectan la resistividad de los aislantes?

23. Enlistar las propiedades de los sólidos que son poco afectadas por la presencia de pequeñas concentraciones de impurezas químicas. Enlistar propiedades de los sólidos que se afectan fuertemente por la presencia de pequeñas concentraciones de impurezas químicas.

24. Dar un argumento, similar al presentado en el texto para semiconductores tipo-n, que explique la variación de $\mathscr{E}_F$ con respecto a T en un semiconductor tipo-p.

25. Explicar por qué las curvas de energía de Fermi como función de la temperatura son diferentes para diferentes concentraciones de impurezas como se muestra en la figura 13-15.

26. Explicar por qué en un diodo semiconductor la región de transición en la junta es más angosta cuando el envenenamiento es fuerte que cuando el envenenamiento es ligero.

27. Reestructurar el análisis respecto al funcionamiento de una unión rectificadora p-n, en términos de flujo de agujeros.

PROBLEMAS

1. En la figura 13-21 se muestran esquemáticamente cuatro distribuciones de densidad de carga para electrones de valencia como función de la posición de átomos iones o moléculas (que se muestran

como puntos en la parte inferior). Determinar, para cada distribución (a), (b), (c), (d), cual es el tipo de enlace de sólidos que les corresponde.

2. Cada elemento en el renglón de la tabla periódica que va del litio al neón tiene una forma sólida (algunos a muy bajas temperaturas). También se pueden formar sólidos con ciertos compuestos de dos elementos de este renglón. Para todos estos sólidos, describir su enlace y definir si el sólido es un metal, un semiconductor o un aislante.

3. Describir el enlace de los sólidos que se forman con elementos simples de la columna de la tabla periódica que va del carbón hasta el plomo y definir si el sólido es un metal, un semiconductor o un aislante.

4. Describir el tipo de enlace en los sólidos que se describen a continuación. (a) Refleja la luz en el visible; la resistividad eléctrica aumenta con la temperatura; punto de fusión debajo de 1000°C. (b) Refleja luz en el visible; la resistividad eléctrica disminuye conforme la temperatura aumenta; punto de fusión arriba de 1000°C. (c) Transmite luz en el visible; conduce electricidad sólo a altas temperaturas. (d) Transmite luz en el visible; no conduce electricidad sin importar la temperatura. (e) Transmite luz en el visible; muy bajo punto de fusión.

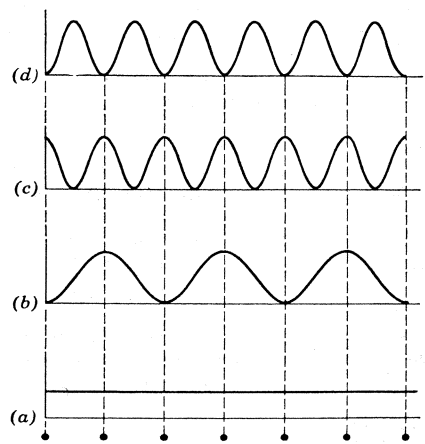


FIGURA 13-21
Densidades de carga para los electrones de valencia en los cuatro sólidos que se consideran en el problema 1.

5. El campo **E** producido en un punto **r** por un dipolo eléctrico **p** está dado por r^{-7}.

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\mathbf{p}}{r^3} - 3\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}}{r^5}\mathbf{r}\right)$$

donde el dipolo se encuentra en el origen de las coordenadas. (a) Una molécula con un momento dipolar eléctrico **p** inducirá sobre una molécula vecina, un momento dipolar eléctrico **p′** donde $\mathbf{p}' = \alpha\mathbf{E}$, siendo α la polarizabilidad de la molécula vecina. Demostrar que la energía potencial mutua de los dipolos interactuantes es

$$V = -\mathbf{p}'\cdot\mathbf{E} = -\frac{\alpha}{(4\pi\epsilon_0)^2}(1 + 3\cos^2\theta)\frac{p^2}{r^6}$$

donde θ es el ángulo entre **r** y **p**. (b) Demostrar que la fuerza es atractiva y que varía como r^{-7}.

6. Para sólidos iónicos, encontrar el orden de magnitud del campo eléctrico necesario para liberar electrones de las capas llenas de los iones. (Sugerencia: considerar la energía de enlace de un electrón y las dimensiones de un ion).

7. Encontrar la región del espectro electromagnético en la cual los cristales de Si, Ge, CdS, KCl, y Cu se vuelven opacos. Las energías de las bandas de energía prohibida, $\mathscr{E}_g$ son Si = 1.14 eV; Ge = 0.67 eV; CdS = 2.42 eV; KCl = 7.6 eV; Cu = OeV.

8. (a) Utilizando la física clásica demostrar que la resistividad de un metal a una temperatura cercana a la del ambiente, es proporcional a la potencia 3/2 de la temperatura absoluta, en desacuerdo con la dependencia lineal que se observa experimentalmente. (Sugerencia: demostrar que $\bar{v}$ es proporcional a $\propto T^{1/2}$ y $\lambda \propto T^{-1}$.) (b) ¿Cómo es que la aplicación de ideas de la mecánica cuántica y de la mecánica estadística proporcionan la dependencia correcta de la resistividad con la temperatura?

9. Para electrones de cobre a temperatura ambiente, comparar los valores de; (a) velocidad de arrastre, (b) la velocidad térmica, y (c) la velocidad correspondiente a la energía de Fermi o *velocidad de Fermi.* (Sugerencia: utilizar la tabla 11-2. Un alambre de cobre de 0.1 cm. de diámetro, fácilmente puede transportar una corriente de 5 A).

10. A partir del valor del coeficiente de Hall, -0.3×10^{-10} m^3/coul, calcular el número de electrones que conducen electricidad por cada átomo de aluminio. La densidad del aluminio es 2.7×10^3 kg/m^3. ¿Qué sugiere este resultado respecto a la estructura de bandas del aluminio?

11. (a) Demostrar que el coeficiente de Hall para un semiconductor, en el cual existe conducción tanto de agujeros como de electrones, está dado por $(p\mu_p^2 - n\mu_n^2)/e(p\mu_p + n\mu_n)^2$. (b) Si en cierto semiconductor no hay efecto Hall, ¿qué fracción de la corriente se debe a los agujeros?

12. El cobre es un metal monovalente, peso atómico 64, y una densidad de 8g/cm^3 . (a) Calcular la energía de Fermi en electrónvolts a 0°K. (b) Estimar la anchura de la banda de conducción.

13. (a) Calcular la energía de Fermi de una aleación con 10% de zinc (que es divalente) en cobre, suponiendo que la aleación posee la misma estructura atómica y espaciamiento interatómico que el cobre. (b) ¿Cómo se compara la anchura de la banda de conducción de la aleación con la del cobre?

14. Hacer una estimación de la anchura de la banda de conducción en un metal cuya distancia internuclear tiene el valor típico de 3.5×10^{-10} m.

15. La *temperatura de Fermi* se define como $T_F = \mathscr{E}_F/k$. (a) Utilizando la tabla 11-2, calcular la temperatura de Fermi del sodio. (b) ¿Qué dice lo anterior respecto a la aplicación de consideraciones clásicas a metales a temperatura cercana a la ambiente? (c) ¿Qué dice respecto a la densidad de electrones de conducción en un metal a temperatura ambiente?

16. La energía de Fermi en Litio es de 4.72 eV. (a) Calcular la velocidad de Fermi. (b) Calcular la longitud de onda de de Broglie de un electrón moviéndose a la velocidad de Fermi y compararla con la distancia interatómica.

17. Calcular, para el litio, una relación aproximada entre su calor específico electrónico y el calor específico de la red a temperatura ambiente. (Sugerencia: utilizar los resultados del ejemplo 13-2, justificando su uso).

18. (a) Demostrar que el efecto de la periodicidad de la red a sobre potenciales periódicos que tienen funciones de Bloch como soluciones consiste en modular la solución correspondiente al modelo del electrón libre, de modo que $\psi(x+a) = \psi(x)e^{ika}$. (b) Demostrar que $e^{ika} = 1$ en las fronteras de la zona de Brillouin. Comentar sobre el significado de este resultado.

19. ¿A qué temperatura aumentará el número de electrones de conducción por un factor de 20 sobre el número correspondiente a temperatura ambiente, en el caso del germanio? El intervalo de energías prohibidas es de 0.67 eV.

20 (a) Demostrar que el número de electrones por unidad de volumen en la banda de conducción de un semiconductor intrínseco, está dado por $\mathscr{N}_c e^{-(\mathscr{E}_c - \mathscr{E}_F)/kT}$, donde $\mathscr{N}_c = 2(2\pi mkT)^{3/2}/h^3$, y donde $\mathscr{E}_c$ es la energía del umbral de la banda de conducción. (b) Demostrar que el número de agujeros por unidad de volumen en la banda de valencia de un semiconductor intrínseco, está dado por $\mathscr{N}_v e^{-(\mathscr{E}_F - \mathscr{E}_v)/kT}$, donde $\mathscr{N}_v = 2(2\pi mkT)^{3/2}/h^3$, y donde $\mathscr{E}_v$ es el límite superior de la banda de valencia.

21. Utilizando las expresiones para el número de electrones en la banda de conducción y el número de agujeros en la banda de valencia, dados en el problema 20 y la neutralidad de la carga, determinar la posición de la energía de Fermi en un semiconductor intrínseco.

22. (a) Demostrar que el producto del número de agujeros en la banda de valencia por el número de electrones en la banda de conducción, depende únicamente de la temperatura y de la energía del intervalo prohibido. (b) Demostrar que la conductividad de un semiconductor intrínseco puede ser utilizada para medir la energía del intervalo prohibido, calculando el $\ln \sigma$.

23. Escribir una expresión exacta para $\mathcal{N}_d^+$ y $\mathcal{N}_d^0$, o sea, las concentraciones de donantes ionizados y neutrales respectivamente, en un semiconductor que contiene impurezas en una concentración $\mathcal{N}_d$.

24. (a) La posición de la energía de Fermi en un semiconductor con impurezas, se puede determinar de la condición de neutralidad de carga: $\mathcal{N}_n + \mathcal{N}_a^- = \mathcal{N}_p + \mathcal{N}_d^+$, donde $\mathcal{N}_n$ es el número de electrones en la banda de conducción $\mathcal{N}_a^-$ es el número de aceptantes ionizados, $\mathcal{N}_p$ es el número de agujeros en la banda de valencia y $\mathcal{N}_d^+$ es el número de donantes ionizados. Suponiendo que $\mathcal{N}_a^- = 0$ y $\mathcal{N}_n \gg \mathcal{N}_p$ demostrar que la neutralidad de la carga conduce a una ecuación cuadrática en $e^{\mathscr{E}_F/kT}$ que tiene la solución

$$e^{\mathscr{E}_F/kT} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\dfrac{\mathcal{N}_d}{\mathcal{N}_c} e^{(\mathscr{E}_c - \mathscr{E}_d)/kT}}}{2e^{-\mathscr{E}_d/kT}}$$

donde $\mathscr{E}_c$ es el umbral de la banda de conducción y $\mathscr{E}_d$ es la energía del nivel de donantes. (b) Esta ecuación se puede resolver en dos límites. Uno de ellos es

$$4\frac{\mathcal{N}_d}{\mathcal{N}_c} e^{(\mathscr{E}_c - \mathscr{E}_d)/kT} \ll 1$$

Esto quiere decir que $\mathcal{N}_d$ es pequeño o que T es grande. Utilizar un desarrollo binominal de la raíz cuadrada para demostrar que $\mathcal{N}_n = \mathcal{N}_d$ y $\mathscr{E}_F = \mathscr{E}_c + kT \ln (\mathcal{N}_d/\mathcal{N}_c)$. Esta es la región de *agotamiento*. Todos los donantes se encuentran ionizados, pero ningún electrón de la banda de valencia es excitado. (c) En el otro límite,

$$4\frac{\mathcal{N}_d}{\mathcal{N}_c} e^{(\mathscr{E}_c - \mathscr{E}_d)/kT} \gg 1$$

Una vez más, $\mathcal{N}_d$ es grande y T pequeña. Demostrar que

$$\mathcal{N}_n = \sqrt{\mathcal{N}_d \mathcal{N}_c}\, e^{-(\mathscr{E}_c - \mathscr{E}_d)/2kT}$$

y

$$\mathscr{E}_F = \frac{\mathscr{E}_c + \mathscr{E}_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{\mathcal{N}_d}{\mathcal{N}_c}$$

Esta es la región *extrínseca*. En este caso, los donantes están siendo ionizados.

25. Dibujar un diagrama de niveles de energía, como el de la figura 13-16, para un transistor de junta n-p-n y describir su acción como amplificador de potencia en términos de la figura.

26. La corriente que fluye en una junta p-n, es proporcional al número de electrones en la banda de conducción. (a) Para una junta p-n no polarizada, demostrar que la corriente de la región p a la región n es proporcional a $e^{-(\mathscr{E}_v - \mathscr{E}_F)/kT}$ y que esta corriente es igual a la que fluye de la región n a la región p, de modo que no existe un flujo neto de corriente. (b) Cuando se aplica un potencial de polarización demostrar que el flujo neto de carga por unidad de área de la unión es proporcional a

$$e^{-(\mathscr{E}_v - \mathscr{E}_F)/kT}(e^{eV/kT} - 1)$$

donde eV es positivo para polarización directa y negativo para polarización inversa.

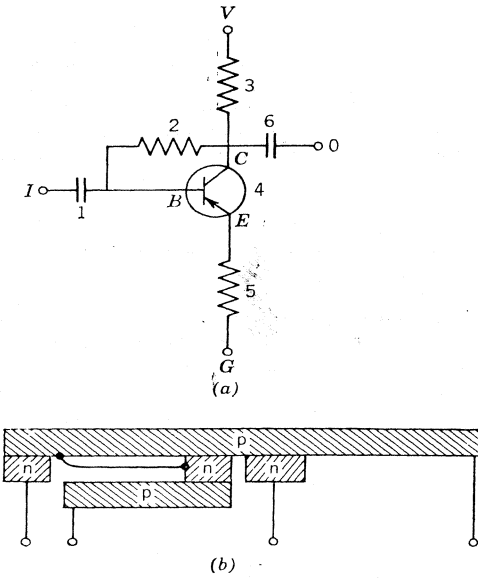


FIGURA 13-22
Circuito integrado considerado en el problema 27.

27. Una junta p-n es una capa doble de cargas opuestas separadas por una distancia pequeña y tiene las propiedades de un capacitor. La resistividad de un semiconductor se puede controlar adicionando impurezas (envenenamiento). Por lo tanto, los elementos de un circuito transistor como el de la figura 13-22*a* se pueden construir sobre un semiconductor p-n-p, si se van eliminando las capas adecuadas como se muestra en la figura 13-22b. Esto es un circuito integrado. Denotar las partes apropiadas de la figura 13-22b con los números y letras correspondientes de la figura 13-22*a*.

14

Sólidos-Superconductores y propiedades magnéticas

14.1 Superconductividad 557

Revisión de las teorías de conductividad basadas en el movimiento del electrón independiente: dependencia de la conductividad con la temperatura; corriente sin resistencia en los superconductores; temperatura crítica; efectos Meissner y su relación con la corriente sin resistencia; campo crítico; efecto isotópico y su evidencia para la importancia de las vibraciones de la red; interacción electrón-electrón por medio de intercambio de fonón; condiciones por la formación de pares de Cooper; movimiento ordenado de pares bajo la aplicación de un campo eléctrico; energía de enlace de pares; origen de la brecha de energía, ancho de la brecha y su relación con la temperatura crítica; estimación del tamaño y densidad de los pares; superconductores tipo II; cuantización del flujo.

14.2 Propiedades magnéticas de sólidos 566

Relaciones entre la inducción magnética, la magnetización, la intensidad del campo magnético y la susceptibilidad magnética; diamagnetismo y Ley de Lenz; comparación de las susceptibilidades diamagnética, paramagnética y ferromagnética.

14.3 Paramagnetismo 567

Papel de los momentos dipolares magnéticos permanentes independientes; susceptibilidades calculadas para un sistema de átomos con dos orientaciones de spin; la ley de Curie como una aproximación; comparación con el experimento; susceptibilidad paramagnética en metales.

14.4 Ferromagnetismo 571

Temperatura de Curie; falla de la explicación clásica de la interacción dipolo-dipolo; papel de las interacciones de intercambio; estructura de las bandas $3d$ en elementos de transición; bandas parciales; origen del ferromagnetismo; dominios; histéresis; magnetismo permanente.

14.5 Antiferromagnetismo y ferrimagnetismo 577

Propiedades; papel de las interacciones de intercambio.

Preguntas 578

Problemas 579

14

Sólidos-Superconductores y propiedades magnéticas

14.1 Superconductividad

Poco después del descubrimiento del electrón, se confirmó que las altas conductividades eléctrica y térmica de los metales podrían atribuirse al movimiento de los electrones en el metal. Las teorías clásicas de la conducción en metales trataban estos electrones como un gas de partículas independientes dentro del metal y que chocaban con las imperfecciones de la red. Se pudieron explicar muchos hechos experimentales de las conductividades eléctrica y térmica utilizando métodos de la teoría cinética clásica. Con el advenimiento de la mecánica cuántica se hizo posible el tomar en cuenta la naturaleza ondulatoria de los electrones y el principio de exclusión , así como la clarificación de un número de fenómenos que no habían sido explicados con anterioridad. Por ejemplo, la necesidad de usar la distribución de Fermi para los electrones libres condujo a la compresión de la contribución electrónica a los calores específicos de los sólidos. La posterior aplicación de las ideas ondulatorias condujo a la cuantización de los niveles de energía de la teoría de bandas de los sólidos, lo cual vino a explicar el amplio intervalo observado en las conductibilidades en los sólidos normales. El enfoque del modelo de electrón libre promediaba las variaciones en la interacción de los electrones entre sí y entre electrones con iones de la red y era capaz de explicar la resistencia al flujo de electrones bajo condiciones normales. Sin embargo, una grave falla de este modelo de partícula independiente es su incapacidad para explicar la superconductividad. Para entender este fenómeno se requiere tomar en cuenta el comportamiento colectivo de los electrones y los iones, el llamado *efecto de muchos cuerpos*, en los sólidos. Ahora examinemos la superconductividad.

Como se vió, son muchos los factores que contribuyen a la resistividad eléctrica de un sólido. Los electrones se dispersan por las desviaciones de una red perfecta debido a los defectos estructurales o impurezas en un cristal. Además, hay vibraciones de los iones de la red en modos normales que constituyen algo como ondas de sonido que viajan a través del sólido; y a las cuales nos referimos como *fonones*. Mientras más alta es la temperatura, existen más fonones presentes en la red. Cuando los fonones están presentes, existe una interacción electrón-fonón que dispersa los electrones de conducción y ocasiona más resistencia. Por lo tanto, la resistencia eléctrica de un sólido debería de crecer conforme lo hiciera la temperatura, pero se espera una resistencia residual aun en las cercanías del cero absoluto debida a las imperfecciones del cristal. Esto pone en evidencia que *la resistencia eléctrica de algunos sólidos desaparece completamente a temperaturas suficientemente bajas.*

En 1911, Kammerlingh-Onnes encontró que la resistencia eléctrica del mercurio sólido caía a un valor inconmensurablemente pequeño cuando se enfriaba por debajo de cierta temperatura, llamada *temperatura crítica* T_c. El mercurio pasa de un estado normal a un estado superconduc-

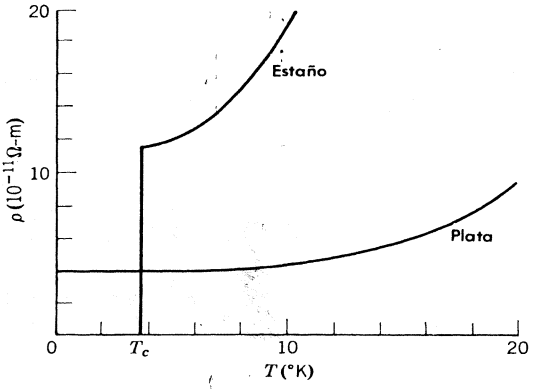


FIGURA 14-1
Gráfica de la resistividad ρ en función de la temperatura T, que muestra la caída a cero a la temperatura crítica T_c para un superconductor y la resistividad finita de un metal normal al cero absoluto.

tor cuando la temperatura cae por debajo de $T_c = 4.2°K$. Se ha encontrado que muchos otros elementos y muchos compuestos y aleaciones se hacen superconductores con temperaturas críticas tan altas como 23° K, pero no todos los materiales se hacen superconductores. La figura 14-1 muestra la resistividad a temperaturas muy bajas para un superconductor, estaño y un no-superconductor, plata. En un superconductor se pueden establecer las corrientes y persistir por años sin que decaigan de manera notable.

En 1933, Meissner y Oschnfeld encontraron que cuando se enfría una substancia superconductora por debajo de su temperatura crítica en presencia de un campo magnético aplicado, expulsa todo el flujo magnético de su interior. Si el campo se aplica después de haber enfriado la substancia por debajo de su temperatura crítica, el flujo magnético se excluye del superconductor. Por lo tanto, un superconductor actúa como un material diamagnético perfecto. En la figura 14-2 se ilustran ambos efectos *Meissner*. Según la ley de Lenz, cuando a través de un circuito está cambiando un flujo magnético, se establece una corriente inducida en una dirección tal que se oponga al cambio en el flujo. En un átomo diamagnético los electrones orbitales ajustan sus movimientos rotacionales para producir un momento magnético neto opuesto al campo magnético aplicado externamente. Análogamente se puede decir que un campo magnético externo no penetra al interior de una substancia superconductora porque en un superconductor los electrones de conducción cuyo movimiento no está restringido como en un átomo, ajustan sus movimientos para producir un campo magnético contrario. A este respecto, el superconductor se comporta completamente como un solo átomo diamagnético. Por lo tanto, las dos características principales de los superconductores, la exclusión de flujo magnético y la ausencia de resistencia al flujo de corriente, están relacionadas entre sí. Es necesario tener una corriente persistente (sin resistencia) para mantener la exclusión del flujo cuando el campo externo está presente.

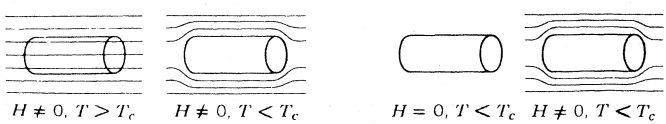


FIGURA 14-2
Izquierda: Ilustración esquemática de la expulsión. *Derecha:* Exclusión del flujo magnético en un superconductor. A ambos se les denomina *efectos Meissner*.

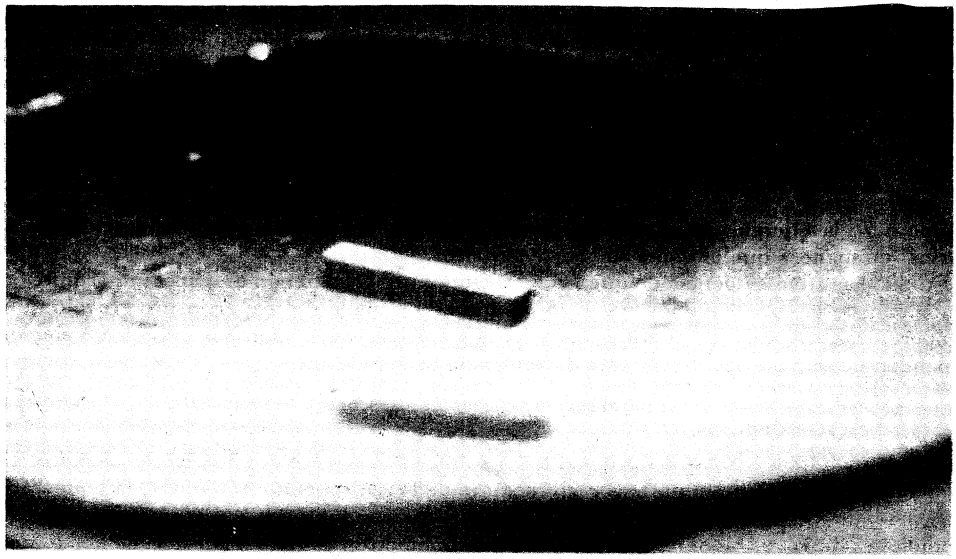


FIGURA 14-3
Un imán permanente flotando sobre una superficie superconductora.

La figura 14-3 muestra una fotografía de una levitación. Si sobre una superficie perfectamente conductora se coloca un pequeño imán permanente, éste flotará. Si se coloca al imán sobre la superficie y posteriormente ésta se hace superconductora (bajando su temperatura), éste se levantará y flotará. Debido a que el cuerpo superconductor excluye las líneas de flujo magnético asociadas con un imán, se genera una fuerza repulsiva lo suficientemente grande como para sobrepasar el peso del imán. Se han hecho estudios de ingeniería bastante confiables que han indicado la factibilidad de utilizar este fenómeno para proporcionar soportes muy suaves para trenes de pasajeros de muy alta velocidad.

Se ha encontrado que si el campo externo se incrementa más allá de cierto valor, llamado el *campo crítico* H_c, el metal deja de ser superconductor y se convierte en normal. El valor de este campo crítico para un material dado depende de la temperatura tal y como se muestra en la

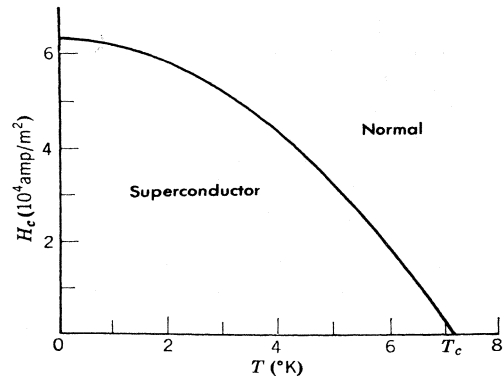


FIGURA 14-4
Variación del campo crítico H_c con la temperatura para el plomo. Obsérvese que H_c es cero cuando la temperatura T es igual a la temperatura crítica T_c.

figura 14-4 para el caso del plomo. De este modo, conforme el campo magnético externo aumenta, la temperatura crítica baja hasta que $H > H_c(8°\text{K})$ donde ya no habrá superconductividad para ninguna temperatura. Esto se puede entender como sigue. Suponga que a alguna temperatura por debajo de T_c se enciende el campo magnético. Entonces, actuará el superconductor para excluir este campo (el efecto Meissner), el decremento en la energía del campo magnético aparece con el incremento en la energía de los electrones que constituyen la corriente superconductora. Conforme aumenta la intensidad del campo magnético externo, también aumenta la energía adquirida por el superconductor. Para el valor crítico del campo, H_c, la energía del estado superconductor se hace mayor que la energía del estado normal de manera que el material se hace normal.

En 1950 se tuvo evidencia de que las vibraciones de la red tienen un papel importante en el fenómeno de la superconductividad, lo cual ocurrió cuando el experimento reveló que la temperatura crítica de los cristales constituidos por diferentes isótopos del mismo elemento dependen de la masa isotópica, esta dependencia está dada por

$$M^{1/2}T_c = \text{constante} \tag{14-1}$$

donde M es la masa isotópica promedio del sólido, a esto se le domina *efecto isotópico*. Esta relación demuestra que al no haber vibraciones de la red (cuando $M \to \infty$), la temperatura crítica tenderá a cero (por lo tanto, no habrá superconductividad). La importancia de las vibraciones de la red sugiere que una interacción electrón-fonón es la causa de la superconductividad. Si se espera dar una explicación teórica de la superconductividad, no es posible continuar ignorando las interacciones electrón-fonón que fueron despreciadas en el modelo de sólido de partícula independiente. En 1957, Bardeen, Cooper y Schrieffer propusieron una teoría microscópica detallada, ahora conocida como la *teoría* BCS, en la cual se incluyen esas interacciones. Las predicciones de la teoría BCS concuerdan muy bien con los resultados experimentales. Ahora se considerará una descripción cualitativa de esta teoría.

Cuando un electrón en un sólido pasa por iones adyacentes en la red, puede actuar sobre estos iones mediante un conjunto de atracciones de Coulomb que dan a cada uno un impulso que causa que ellos se muevan juntos ligeramene. Debido a las propiedades elásticas de la red, esta región de densidad de carga positiva aumenta y se propaga como una onda que lleva impulso a través de la red. ¡El electrón ha emitido un fonón! El impulso que lleva el fonón lo ha suministrado el electrón que cambia su impulso cuando emite a aquel. Si un segundo electrón pasa por la región en movimiento de densidad de carga positiva creciente, experimentará una interacción de Coulomb atractiva y así podrá absorber todo el impulso que lleva la región en movimiento. Esto es, el segundo electrón puede absorber al fonón, absorbiendo de esta manera el impulso suministrado por el primer electrón. El efecto neto es que los dos electrones han intercambiado algo de impulso entre ellos y han interactuado de este modo. No obstante que la interacción fue en dos pasos, incluyendo un fonón como un intermediario, ciertamente fue una interacción entre los dos electrones. Además, fue una interacción *atractiva* ya que el electrón involucrado en cada uno de los pasos participó en una interacción de Coulomb atractiva. La teoría BCS muestra que, en ciertas condiciones, la atracción entre dos electrones debida a una sucesión de intercambio de fonón puede exceder ligeramente la repulsión que estos ejercen directamente entre sí debido a la interacción de Coulomb (apantallamiento) de sus cargas iguales. Entonces los electrones se verían unidos débilmente y formarán el llamado *par de Cooper*. Se verá que los pares de Cooper son la causa de la superconductividad.

Las condiciones para su formación en número suficientemente grande como para permitir la superconductividad son: (1) que la temperatura sea lo suficientemente baja como para hacer que el número de fonones térmicos al azar presentes en la red sea pequeño. (Ellos inhibirían los procesos ordenados involucrados en la superconductividad; (2) que la interacción entre un electrón y un fonón sea fuerte, de modo que una substancia que tenga una resistencia relativamente baja a temperatura ambiente, por razón de que sus electrones de conducción

interactúen débilmente con las vibraciones térmicas de la red, no será un posible superconductor a bajas temperaturas); (3) que el número de electrones en estados justamente por debajo de la energía de Fermi sea grande (estos son los electrones energéticamente disponibles para formar los pares de Cooper); (4) que los dos electrones tengan sus spin "antiparalelos" (y que por lo tanto su función espacial sea simétrica en un intercambio de marcas, lo cual significa que ellos estarán lo suficientemente juntos para formar un par) y (5) que al no haber un campo eléctrico aplicado externamente, los dos electrones de un par tengan sus impulsos de igual magnitud pero dirección opuesta (como se explicará a continuación, esto facilita la participación del máximo número de electrones en la formación de pares).

Debido a que los pares de Cooper están ligados débilmente, con frecuencia se rompen para formarse nuevamente, por lo regular con parejas diferentes; por la misma razón, los pares de Cooper son grandes. (En el ejemplo 14-2 se estimará que la separación típica de los electrones en un par es del orden de 10^4 Å.) Por lo tanto, dentro de la región ocupada por los electrones de un par existirán muchos otros electrones que igualmente podrían participar en el proceso de aparamiento. Si ellos pueden hacer esto, el sistema estará ligado más fuertemente y por lo tanto será más estable. El sistema logra esto manteniendo el impulso lineal igual a cero al no haber un campo eléctrico aplicado. El estudio de la formación de un par demuestra que el impulso total de cualquier par es una constante, ya que el resultado neto de cambiar un fonón entre dos electrones es preservar el impulso total del par. Si todos los pares tienen el mismo impulso total constante, entonces no habrá inhibición al proceso de pares antiguos que se rompen y pares nuevos que se crean, debido a que cualquier par se puede convertir en otro por el intercambio de un fonón y por lo tanto el número de pares que estará presente será máximo. Del argumento cualitativo que se ha dado, esta conclusión es posible y constituye un fundamento para los cálculos de la teoría BCS que muestra que las funciones de onda que describen la formación de pares están en fase, se suman constructivamente y llevan a una probabilidad total grande para dicha formación cuando todos los pares tienen el *mismo* impulso total. Al no haber un campo eléctrico aplicado, obviamente las consideraciones de simetría requieren que el valor común del impulso total del par sea cero. De esta manera, se puede observar la causa de que en estas circunstancias los dos electrones de cada par tienen sus impulsos lineales de igual magnitud pero dirección opuesta. También se observa que el estado base del sistema está muy ordenado, en él, todos los pares en la red hacen exactamente lo mismo en cuanto al movimiento de sus centros de masa. Este orden se extiende a través de la red y no sólo a la región ocupada por un par, ya que los pares son relativamente grandes y hay muchos de ellos, de modo tal que existe traslape múltiple. El orden se propaga a través de las regiones adyacentes traslapadas.

Cuando se aplica un campo eléctrico externo, los pares, que se comportan como partículas con dos cargas electrónicas, se mueven a través de la red bajo la influencia del campo. Pero lo hacen de manera que preservan el orden ya que mantendrán su número en un máximo. Por lo tanto llevarán corriente moviéndose a través de la red con todos sus centros de masa teniendo exactamente el mismo impulso. El movimiento de cada par está determinado por el movimiento de los restantes y así ninguno de ellos se puede involucrar en la dispersión caótica producida por las imperfecciones de la red que causan una resistencia eléctrica a baja temperatura. Esta es la causa de que el sistema sea un superconductor.

Es tentador pensar que un par de Cooper actuara como un bosón, ya que contiene dos fermiones. Si esto se pudiera hacer, la superconductividad sería solamente otro ejemplo de la condensación de Bose, como en la superfluidez del helio líquido. Esto es, sería un movimiento completamente correlacionado de un conjunto de bosones en el mismo estado cuántico debido al efecto del factor de aumento $(1+n)$ de bosones estudiado en el capítulo 11. Las teorías que precedieron la teoría BCS trataron infructuosamente de utilizar este enfoque; la razón por la cual esto no es válido es que los electrones individuales en cada par están débilmente ligados al par, lo cual también significa que el par es grande. Como una consecuencia, las eigenfunciones para el sistema de pares traslapados deberá tomar en cuenta el intercambio de marcas de un electrón de un par y un electrón de otro par, así como el intercambio de marcas de un par completo con otro par completo. En este último intercambio la eigenfunción del sistema no cambiará de signo debido a

que las marcas de los dos fermiones se han intercambiado, pero en el primero, las eigenfunciones cambian de signo ya que solamente se intercambia la marca para un fermión. Por lo tanto, los pares de Cooper no son ni puramente bosonoides (no cambian de signo), ni puramente fermionoides (cambian de signo), con respecto a todo el intercambio de marcas en las eigenfunciones que deberían considerarse. En un sistema de átomos de helio fuertemente ligados el único tipo de intercambio de marcas que se debe considerar es un intercambio de las marca de un átomo con la marca de otro. De hecho, tal intercambio involucra un número par de intercambios de marcas en los fermiones (cada átomo contiene dos electrones, dos protones y dos neutrones) de manera que la eigenfunción no cambia de signo y los átomos del sistema actúan como bosones.

De acuerdo con la teoría BCS, la energía de enlace de un par de Cooper en el cero absoluto es alrededor de $3kT_c$. Conforme aumenta la temperatura la energía de enlace se reduce y se va a cero cuando la temperatura se iguala a la temperatura crítica T_c. Por encima de T_c, un par de Cooper no está ligado.

Para dos electrones, cada uno en un estado de partícula simple justamente por debajo de la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$, con una interacción de enlace electrón-electrón en el cero absoluto es ventajoso energéticamente promoverse ellos mismos a un estado vacío justamente por encima de $\mathscr{E}_F$ donde ellos pueden interactuar de manera que formen un par de Cooper. La energía necesaria para poner los electrones en estados de partícula simple más altos está más que compensada por la energía disponible para el enlace de los pares de Cooper que ellos forman. Por lo tanto, la distribución de Fermi en el cero absoluto de un superconductor es inestable, en el sentido de que los electrones en los estados dentro de un rango del orden de kT_c por debajo de la energía de Fermi dejarán aquellos estados y entrarán a estados dentro de un rango similar por encima de la energía de Fermi, donde formarán pares. El resultado es que la distribución a $T=0$ de estados ocupados de un superconductor aparece como una distribución de Fermi a $T = T_c$ para un conductor normal. La razón por la cual los electrones deberán estar por encima de $\mathscr{E}_F$ para encontrarse libres de formar pares, es que solamente por encima de $\mathscr{E}_F$, se encuentra un número grande de estados desocupados, que deberán existir para que los dos electrones de un par entren después de que han cambiado su impulso mediante la emisión de un fonón por parte de uno de ellos y la absorción de un fonón por parte del otro.

No obstante existe una distribución casi continua de estados de particula libre disponible para *cada electrón* en un superconductor a $T = 0$, la distribución de estados disponibles en el sistema está muy lejos de ser continua. Por lo que concierne al sistema, existe su estado base de superconductor y una *brecha de energía* de ancho $\mathscr{E}_g$ en la cual no hay ningún estado y por encima de la brecha un conjunto de estados que no son superconductores. El ancho de la brecha $\mathscr{E}_g$ es igual a la energía de enlace de un par de Cooper. La brecha aparece si un electrón del sistema en un estado de partícula simple en la región de ancho $\sim kT_c$ en las vecindades de $\mathscr{E}_g$ absorbe energía de alguna fuente, de modo que efectúa una transición de este estado a otro de partícula simple que difiere en energía en un infinitésimo, entonces el par del cual era miembro se romperá y la energía de enlace del par se trasferirá al sistema. Por lo tanto, la fuente deberá ser capaz de suministrar una energía igual a una energía de enlace del par antes de que un electrón cercano a $\mathscr{E}_F$ pueda realizar una transición al estado energéticamente más cercano. (Para un electrón que se encuentre por debajo de $\mathscr{E}_F$, deberá suministrarse aún más energía para excitarlo, despreciando el hecho de que no se encuentre en un par, ya que todos los estados cercanos están prácticamente ocupados). Por lo tanto, la energía mínima aceptable para el estado base del sistema, que es el ancho de su brecha de energía, es la energía de enlace de un par de Cooper. Los estados que empiezan encima de la brecha no son superconductores ya que en ellos el sistema tiene energía suficiente para que los pares se rompan.

El ancho de la brecha a $T=0$ es $\mathscr{E}_g \simeq 3kT_c$, pero disminuye conforme la temperatura aumenta y alcanza un espesor igual a cero para $T = T_c$ donde los pares dejan de estar ligados. Para temperaturas por debajo de T_c el estado base superconductor corresponde a un estado cuántico en gran escala en el cual los movimientos de todos los electrones e iones están muy correlacionados y, por lo tanto, le toma la brecha de energía $\mathscr{E}_g$ para excitar al sistema al

estado más alto, que no es superconductor y existe más energía que la energía térmica disponible para el sistema. De hecho, para $T = 0.\ 1T_c$ el valor de la brecha de energía se mantiene alrededor de $\mathscr{E}_g = 3kT_c$, mientras la energía térmica es alrededor de $kT = 0.1kT_c$.

Para la mayoría de los superconductores en las proximidades de $T = 0$, la energía necesaria para vencer la brecha corresponde a fotones en el infrarrojo muy lejano o en la región de microondas. La existencia y ancho de la brecha se establece experimentalmente por un cambio brusco en la absorción de radiación infrarroja o de microondas cuando la energía del fotón $h\nu$ cae por debajo de la brecha de energía.

Ejemplo 14-1. La temperatura crítica del mercurio es 4,2° K.
a). ¿Cuál es la brecha de energía en electrónvolts a $T = 0$? Como se estableció con anterioridad, la energía de enlace del par de Cooper o brecha de energía es

$$\mathscr{E}_g \simeq 3kT_c$$

así

$$\mathscr{E}_g \simeq 3 \times 1.4 \times 10^{-23}\,\text{joule/°K} \times 4.2\text{°K} = 1.8 \times 10^{-22}\,\text{joule}$$
$$\simeq 1.1 \times 10^{-3}\,\text{eV}$$

b) Calcular la longitud de onda de un fotón cuya energía es justamente la suficiente para romper los pares de Cooper en el mercurio a $T = 0$. ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentran esos fotones?
La energía es

$$\mathscr{E}_g = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

de modo que la longitud de onda es

$$\lambda = \frac{hc}{\mathscr{E}_g} \simeq \frac{6.6 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg} \times 3 \times 10^{8}\,\text{m/seg}}{1.8 \times 10^{-22}\,\text{joule}} = 1.1 \times 10^{-3}\,\text{m}$$

estos fotones están en la parte de la región de microondas de longitud de onda muy corta.
c). Para ondas electromagnéticas de longitudes de onda más cortas que las encontradas en la parte (b) ¿se comporta el metal como superconductor? Explicar.

No, ya que la energía de los fotones con longitud de onda más corta es lo suficientemente más alta como para romper los pares de Cooper o excitar los electrones de conducción a través de la brecha de energía hacia los estados no superconductores que se encuentran por encima de la brecha. ◀

Ejemplo 14-2. Estimar el tamaño de un par de Cooper de energía de enlace $\mathscr{E}_g$. La función de onda de un par de Cooper está constituida por ondas que describen sus dos electrones componentes con números de onda contenidos en un intervalo Δk que corresponde a un intervalo de energía $\Delta\mathscr{E} \sim \mathscr{E}_g$. El intervalo de energía está centrado en $\mathscr{E}_F$, y el intervalo de números de onda está centrado en el correspondiente k_F. Puesto que la energía de uno de los electrones es

$$\mathscr{E} = \frac{p^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

se tiene

$$\Delta\mathscr{E} = \frac{\hbar^2 2k\Delta k}{2m^*}$$

y

$$\frac{\Delta\mathscr{E}}{\mathscr{E}} = \frac{\hbar^2 k\ \Delta k 2m^*}{m^*\hbar^2 k^2} = \frac{2\Delta k}{k} \sim \frac{\Delta k}{k}$$

Haciendo $\mathscr{E} = \mathscr{E}_F$, $k = k_F$, y $\Delta\mathscr{E} = \mathscr{E}_g$, se tiene

$$\frac{\Delta k}{k_F} \sim \frac{\mathscr{E}_g}{\mathscr{E}_F}$$

Como $\mathscr{E}_g/\mathscr{E}_F \sim 10^{-4}$ en un caso típico, se obtiene

$$\Delta k \sim 10^{-4} k_F$$

como se vio en el capítulo 13 que en la cima de una banda $k = \pi/a$, si los ceros de k y $\mathscr{E}$ se toman en el fondo de la banda tal como se hizo aquí, se pude poner $k_F \sim 1/a$. También se sabe que el espaciamiento de la red es $a \sim 1$ Å. Entonces se encuentra que

$$\Delta k \sim \frac{10^{-4}}{1 \text{ Å}}$$

es el intervalo de números de onda contenido en la función de onda para un par de Cooper. Una propiedad muy general de las ondas ((3-14), que conduce al principio de incertidumbre) establece de inmediato que la extensión de la función de onda en el espacio es

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k} \sim 10^4 \text{ Å}$$

Este el tamaño de un par de Cooper típico.

(b) Estimar la densidad de pares de Cooper en un superconductor.

El ejemplo 13-1 muestra que la densidad de electrones de conducción en un metal es $n \sim 10^{22}/\text{cm}^3$. La fracción que formará pares de Cooper en un superconductor es del orden de $\Delta k/k_F \sim 10^{-4}$. Así que

$$n_{\text{pares de Cooper}} \sim 10^{18}/\text{cm}^3$$

Obsérvese que el volumen de par es $\sim(10^4 \text{ Å})^3 = (10^{-4} \text{ cm})^3 = 10^{-12} \text{ cm}^3$. De modo que un volumen tal contiene ¡ $\sim 10^6$ pares traslapados! ◀

El ancho de la brecha prohibida y la densidad de estados cuánticos en un superconductor se puede determinar a partir de las características voltaje-corriente de una unión tunel. En esas uniones, un metal superconductor y uno normal se encuentran separados por una capa delgada de óxido ($\sim 10^{-9}$ m de espesor). Con la ayuda de un voltaje aplicado, los electrones penetran a través de la barrera representada por la capa de óxido no conductora. En 1962, Josephson predijo que si los metales en ambos lados de la unión son superconductores es posible que fluya una corriente sin voltaje aplicado. Si se aplica un voltaje pequeño (unos cuantos milivolts), aparece una corriente alterna cuya frecuencia está en el intervalo de las microondas. Estos efectos se pueden usar para detectar diferencias de voltaje extremadamente pequeñas y para medir con enorme precisión la relación e/h utilizada en la determinación de las constantes físicas fundamentales. Otros efectos superconductores predichos por Josephson permiten que un número de propiedades cuánticas se puedan visualizar de una manera muy simple, particularmente la cuantización del flujo magnético que se estudiará posteriormente.

Existen muchas aplicaciones importantes de la superconductividad. Una aplicación obvia es la de los electroimanes superconductores, cuyos campos provienen de corrientes que fluyen sin resistencia a través del devanado del imán y que se utilizan en motores eléctricos y generadores. Una dificultad es la tendencia a inducir campos magnéticos en los alambres del devanado, los cuales tienden a destruir su superconductividad. Actualmente se trabaja en encontrar los llamados *superconductores tipo II*, los cuales tienen pares de Cooper cuyas dimensiones son lo suficientemente pequeñas como para permitir que un campo magnético atraviese su camino a lo largo de su longitud en un conjunto de canales localizados. Estos canales pierden su superconductividad pero no así los canales entre ellos. Se ha encontrado que varias aleaciones de niobiotitanio son superconductores del tipo II y además tienen la conveniencia de temperaturas críticas relativamente altas ($T_c \simeq 20°\text{K}$).

La ausencia de disipación de potencia en los elementos superconductores hace posible muchas aplicaciones electrónicas en las cuales los requerimientos de espacio y de tiempos de transmisión son limitados, por ejemplo, en las computadoras. Debido a que los superconductores son diamagnéticos se pueden utilizar para eliminar flujos magnéticos indeseables por ejemplo, esto se puede utilizar para formar el sistema de lentes magnéticas de un microscopio electrónico, para eliminar líneas de campo y mejorar grandemente el poder de resolución práctico del instrumento.

Aparte de estas aplicaciones tecnológicas de la superconductividad, de las cuales se pueden citar muchas más, existe una aplicación creciente de las ideas teóricas a otros campos de la física. Por ejemplo, estas ideas se han aplicado al análisis de la estructura nuclear teniendo mucho éxito en la explicación de hechos experimentales no explicados de otras maneras. En el capítulo siguiente se verán las similitudes entre el modelo colectivo del núcleo y el modelo colectivo BCS de la superconductividad. Algunos de los métodos de la teoría de la superconductividad se han aplicado a las partículas elementales de la física de altas energías, de modo que la teoría sugiere una unicidad observada en varias áreas de la física cuántica.

El efecto Meissner se puede establecer de otra manera, mencionando la posibilidad de inducir corrientes en un espécimen en un campo magnético invariante en el tiempo, simplemente bajando la temperatura. Ese enunciado contradice la ecuación de Maxwell $\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -d\Phi_B/dt$ (o $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B}/\partial t$) y muestra que el efecto Meissner no es un efecto clásico sino un efecto cuántico que se manifiesta a escala macroscópica. Esto se ha confirmado mediante experimentos en anillos superconductores. Si uno de estos anillos en un estado normal se coloca en un campo magnético uniforme y se enfría al estado superconductor, se establecen corrientes eléctricas que fluyen en direcciones opuestas en la superficies interna y externa del anillo tal como se muestra en la parte superior de la figura 14-5. Esto excluye el campo del interior del anillo, pero no afecta el campo dentro del orificio del anillo. Cuando se retira el campo externo, la corriente en la superficie externa desaparece, pero la corriente en la superficie interna persiste. Se dice que el anillo superconductor ha atrapado el campo magnético original en el agujero, como se muestra en la parte baja de la figura 14-5. Cuando se mide el flujo magnético atrapado en el anillo como una función de la intensidad del campo magnético aplicado, se encuentra que el flujo está cuantizado, es decir, aumenta en pasos discretos. El sistema actúa como un átomo de Bohr macroscópico en el cual una eigenfunción

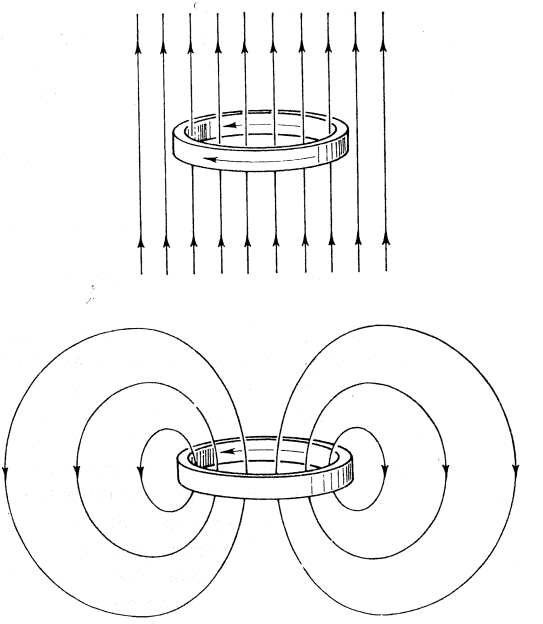


FIGURA 14-5
Arriba: Un anillo de material superconductor se enfría por debajo de la temperatura crítica en presencia de un campo magnético uniforme como se muestra, las corrientes se establecen sobre las superficies interna y externa del anillo; excluyendo al campo del material superconductor que constituye al anillo. *Abajo:* Se suprime el campo externo. La corriente en la superficie interna persiste. El resultado es que el flujo magnético queda atrapado en el agujero encerrado por el anillo.

describe el movimiento correlacionado del conjunto completo de pares de Cooper que viajan alrededor del anillo. La cuantización del flujo aparece debido a que la eigenfunción deberá ser monovaluada. El quantum de flujo es $2\pi\hbar c/q$, donde q es la carga de un par. Las medidas confirman la predicción BCS de que $q = 2e$.

14.2 Propiedades magnéticas de sólidos

Los materiales pueden tener momentos dipolares magnéticos intrínsecos, o pueden tener momentos dipolares magnéticos inducidos en ellos debidos a un campo magnético externo aplicado. En presencia de un campo magnético de inducción los dipolos magnéticos elementales, ya sean permanentes o inducidos, actuarán para establecer para ellos mismos un campo de inducción que modificará el campo original. El estudiante recordará que los momentos magnéticos dipolares que se pueden considerar como corrientes microscópicas (por ejemplo en átomos), son una fuente de *inducción magnética* **B** así como lo son las corrientes macroscópicas (por ejemplo en devanados de imanes). De hecho se puede escribir

$$\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H} + \mu_0\mathbf{M} \tag{14-2}$$

donde **M**, llamada la *magnetización*, es la densidad volumétrica de momento magnético dipolar, y **H**, llamada la *intensidad de campo magnético*, solo está asociada con las corrientes macroscópicas. El vector magnético **H**, que se puede escribir $\mathbf{H} = (\mathbf{B} - \mu_0\mathbf{M})/\mu_0$, en el magnetismo tiene un papel análogo al de **D** en la electricidad, ya que **D** el desplazamiento eléctrico se origina sólo con cargas libres y no con cargas de polarización. El vector magnético **M**, que se puede escribir como μ/V, y que es el momento dipolar magnético por unidad de volumen tiene las mismas dimensiones que **H**.

Para ciertos materiales magnéticos se encuentra, empíricamente, que la magnetización **M** es proporcional a **H**. Por lo tanto se puede escribir

$$\mathbf{M} = \chi\mathbf{H} \tag{14-3}$$

donde la cantidad adimensional χ se conoce como *susceptibilidad magnética*. El problema principal en el estudio de propiedades magnéticas de esos materiales es el de determinar χ para ellos y encontrar la manera como depende de la temperatura T y del valor de **H**. La magnetización **M** se puede poner en términos de χ y **B** como

$$\mathbf{M} = \frac{\chi\mathbf{B}}{\mu_0(1 + \chi)} \tag{14-4}$$

Para esta expresión se puede ver que la susceptibilidad es pequeña comparada con uno, entonces $\mathbf{M} \simeq \chi\mathbf{B}/\mu_0$ y la contribución a **B** debido a los momentos magnéticos, es decir $\mu_0\mathbf{M}$ en (14-2) es pequeña. De hecho es aplicable a materiales magnéticos que son diamagnéticos o paramagnéticos.

Diamagnetismo significa susceptibilidad magnética negativa y *paramagnetismo* susceptibilidad magnética positiva. En los materiales diamagnéticos la magnetización está en dirección opuesta al campo de inducción de manera que χ es negativa en (14-4). El valor de **B** es mayor en la región del material diamagnético de lo que sería si el material no estuviera allí. El origen del diamagnetismo es la *ley de Lenz:* El momento magnético dipolar que proviene de las corrientes inducidas por un campo aplicado, se opone a dicho campo. Un material diamagnético perfecto, tal como un superconductor, excluye todo flujo de su interior de modo que $\mathbf{B} = 0$ y $\chi = -1$ para estos materiales. Sin embargo, para materiales diamagnéticos no superconductores, la magnitud de χ es generalmente menor que 10^{-5}. Por supuesto que en el vacío no existe magnetización y $\chi = 0$. Todas las substancias exhiben diamagnetismo, pero los momentos magnéticos dipolares inducidos causantes de éste están apantallados en la mayoría de las substancias debido a

la existencia de un momento magnético dipolar permanente. En esas substancias, llamadas paramagnéticas, el momento magnético dipolar de los átomos tiende a alinearse en la dirección del campo aplicado. Aquí la magnetización **M** está en la dirección de **B** y la susceptibilidad magnética χ es positiva. Para materiales paramagnéticos típicos $\chi \simeq 10^{-4}$. En presencia de un campo de inducción intenso las substancias diamagnéticas se ven repelidas débilmente y las substancias paramagnéticas atraídas débilmente por el campo, correspondiendo al hecho de que χ es relativamente pequeña para ambos tipos de substancias además de tener el signo opuesto.

Un tercer tipo de materiales magnéticos y sumamente importantes son los llamados *ferromagnéticos*. Ferromagnetismo es la presencia de una magnetización espontánea en los materiales aún en ausencia de un campo de inducción aplicado externamente. Los únicos elementos ferromagnéticos son: hierro, cobalto, niquel, gadolinio y disprosio, pero existen muchos compuestos y aleaciones de estos y otros elementos que son ferromagnéticos. Las substancias ferromagnéticas son fuertemente atraídas aun por campos relativamente débiles siendo sus magnetizaciones muy grandes. Las susceptibilidades ferromagnéticas son tan grandes como 10^5. Existe una conexión entre el ferromagnetismo y el paramagnetismo; sólo aquellos cristales cuyos átomos o moléculas son paramagnéticos individualmente son capaces de presentar el tipo de comportamiento cooperativo que conduce al ferromagnetismo. En las secciones siguientes se examinan en gran detalle el paramagnetismo y el ferromagnetismo y se analizan sus relaciones entre sí y con el diamagnetismo.

14.3 Paramagnetismo

En un material paramagnético los átomos contienen momentos magnéticos dipolares permanentes. Estos momentos están asociados con el spin intrínseco del electrón y con el movimiento orbital de los electrones. (Los momentos magnéticos dipolares electrónicos, de modo que para nuestros fines se pueden despreciar). Un campo de inducción **B** aplicado externamente, tenderá a alinear estos momentos dipolares paralelamente al campo. Debido a que la energía es menor cuando el momento magnético dipolar es paralelo al campo que cuando es antiparalelo, se prefiere el alineamiento paralelo. El resultado es un campo inducido que ayuda al campo aplicado, de modo que la susceptibilidad es positiva. Comparativamente, los efectos diamagnéticos son despreciables. La tendencia de los momentos magnéticos dipolares a alinearse con la dirección del campo es contrarrestada por el movimiento térmico que tiende a hacer aleatorias las direcciones de los dipolos magnéticos. Por lo tanto, la susceptibilidad es dependiente de la temperatura y su valor está determinado por la intensidad relativa de la energía térmica kT y la energía de interacción magnética $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Se espera que la susceptibilidad decrezca con el incremento de temperatura y, con base en ello Curie encontró, para campos pequeños y temperaturas no muy bajas que

$$\chi = \frac{C}{T}$$

donde C es una constante positiva característica del material paramagnético particular. Esta es la llamada *ley de Curie*.

En átomos con subcapas llenas, los momentos magnéticos dipolares de spin y separadamente, los momentos magnéticos dipolares orbitales, se cancelan por pares. Solamente subcapas no llenas pueden tener electrones no apareados, de modo que solamente se espera paramagnetismo en materiales que contienen átomos cuyas subcapas electrónicas están parcialmente llenas. En esos materiales la orientación espacial de los momentos magnéticos dipolares totales puede cambiar sin que cambien las configuraciones electrónicas de los átomos constituyentes. Los gases inertes y muchos iones tienen configuraciones con subcapa cerrada, de modo que no presentan paramagnetismo y son excelentes para estudios diamagnéticos. Similarmente, en

materiales en los cuales se requiere el apareamiento del spin, tales como los cristales covalentes y muchos cristales iónicos, los momentos magnéticos dipolares no pueden cambiar de dirección y esos materiales también son diamagnéticos. El requisito básico para el paramagnetismo en sólidos, es que los momentos dipolares magnéticos individuales tengan algún grado de aislamiento. Los átomos deberán actuar independientemente ya que si las funciones de onda se traslapan de manera significante, la operación de los requisitos mecánico-cuánticos que conciernen con la indistinguibilidad de las partículas tenderá a aparear los momentos magnéticos dipolares. Muchos de los elementos de transición y todas las tierras raras forman sólidos paramagnéticos. En estos casos se tienen subcapas internas no llenas y el aislamiento requerido de los momentos individuales resulta del apantallamiento de estas subcapas internas por las subcapas externas llenas de los propios átomos.

Calculando ahora la susceptibilidad paramagnética para el tipo más simple de sistema, que es uno que contiene átomos separados, en cada uno de los cuales el impulso angular orbital es cero y existe un electrón no apareado de impulso angular de spin con dos posibles orientaciones en el espacio. Imaginando los electrones no apareados colocados en un campo magnético **B** y despreciando la interacción entre esos electrones. Sea n el número de momentos magnéticos dipolares no apareados por unidad de volumen. Si n representa la densidad volumétrica de momentos que son paralelos al campo y $n+$ representa lo mismo para los momentos que son antiparalelos, entonces $n_- + n_+ = n$. Para un alineamiento paralelo del momento dipolar magnético μ la energía potencial magnética es $-\mu B$, y para un alineamiento antiparalelo la energía es μB. Entonces, de la distribución de Boltzmann se tiene para el número en cada estado de energía $n_- = cne^{\mu B/kT}$ y $n_+ = cne^{-\mu B/kT}$, donde c es alguna constante de proporcionalidad. La magnetización resultante, es decir, el momento magnético dipolar por unidad de volumen es

$$M = \mu(n_- - n_+) = \mu cn(e^{\mu B/kT} - e^{-\mu B/kT})$$

es conveniente considerar el momento promedio neto, definido como $\bar{\mu} = M/n$ y dado por

$$\bar{\mu} = \frac{M}{n} = \frac{\mu cn(e^{\mu B/kT} - e^{-\mu B/kT})}{(n_- + n_+)}$$

$$= \mu \frac{cn(e^{\mu B/kT} - e^{-\mu B/kT})}{cn(e^{\mu B/kT} + e^{-\mu B/kT})}$$

o

$$\bar{\mu} = \mu \frac{e^{\mu B/kT} - e^{-\mu B/kT}}{e^{\mu B/kT} + e^{-\mu B/kT}} \tag{14-5}$$

puesto que, bajo circunstancias ordinarias $\mu B \ll kT$, se puede desarrollar las exponenciales y obtener

$$\bar{\mu} \simeq \mu \frac{(1 + \mu B/kT) - (1 - \mu B/kT)}{(1 + \mu B/kT) + (1 - \mu B/kT)} = \frac{\mu^2 B}{kT}$$

entonces, la susceptibilidad paramagnética está dada por

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{n\bar{\mu}}{H} \simeq \frac{n\mu^2 B}{kTH} \simeq \frac{\mu_0 n\mu^2}{kT} \tag{14-6}$$

donde se ha utilizado (14-4), para χ pequeñas, para escribir $B \simeq \mu_0 H$. Por lo tanto, se obtiene una aproximación al resultado de Curie $\chi = C/T$, en el cual $C = \mu_0 n\mu^2/k$ y la susceptibilidad varía inversamente con la temperatura. Obsérvese que (14-5) muestra que si se quita el campo aplicado **B** se tiene $\bar{\mu} = 0$, y no existe magnetización neta. El alineamiento de

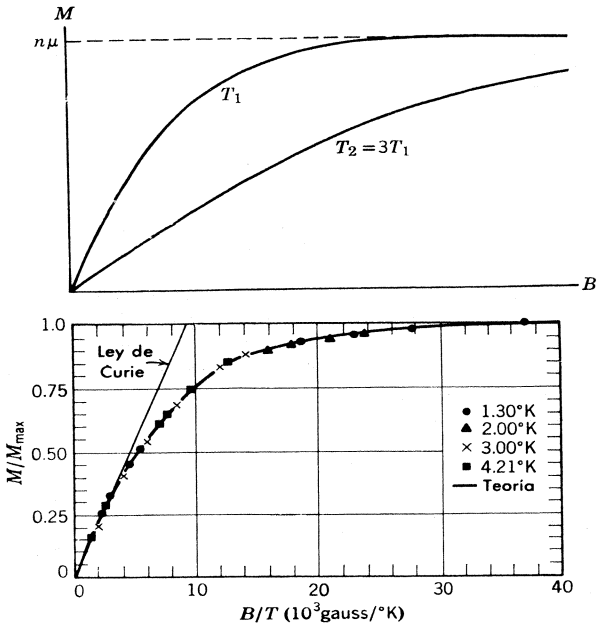


FIGURA 14-6
Arriba: Gráfica de la magnetización M en función de la inducción magnética B en una substancia paramagnética, para dos temperaturas T_1 y $T_2 = 3T_1$. *Abajo:* Gráfica de $M/Mmax$ en función de B/T para la sal paramagnética sulfato de potasio cromo.

los dipolos elementales depende de la presencia del campo, y en su ausencia, el movimiento térmico orienta aleatoriamente los dipolos de modo que la magnetización neta es cero.

En la parte superior de la figura 14-6 se representa la magnetización, $M = n\bar{\mu}$ de (14-5), como función del campo aplicado B para diferentes temperaturas. Para valores pequeños de B, M es esencialmente una línea recta cuya pendiente es mayor mientras menor es la temperatura. Conforme B aumenta la magnetización se aproxima asintóticamente al valor $n\mu$ .Esta es la condición de saturación en la cual todos los momentos magnéticos dipolares no apareados μ están alineados con el campo aplicado **B**. La intensidad del campo requerida para la saturación aumenta con la temperatura.

En la parte inferior de la figura 14-6 se representa la relación $M/M_{\max}$, donde $M_{\max}$ es la magnetización de saturación, en función de B/T para una sal paramagnética. La curva está predicha por los cálculos teóricos exactos, (14-5), los cuales concuerdan muy bien con los puntos experimentales. La predicción de la ley de Curie, (14-6) se ve que es una buena aproximación para valores pequeños de B/T.

Ejemplo 14-3. a) Un campo magnético de inducción de 1.0 tesla, se puede alcanzar con un electroimán de núcleo de fierro. Compare la energía de interacción magnética de un momento dipolar magnético de spin electrónico con este campo con la energía térmica a la temperatura ambiente del spin del dipolo.

Para el momento dipolar magnético de spin se obtiene

$$\mu = \mu_b = \frac{e\hbar}{2m} = 9.3 \times 10^{-24} \text{ joule/tesla}$$

para la energía de interacción magnética a la temperatura ambiente, $t = 300°K$ la energía térmica es

$$\mu B = 9.3 \times 10^{-24}\,\text{joule/tesla} \times 1.0\,\text{tesla} = 9.3 \times 10^{-24}\,\text{joule}$$
$$= 5.8 \times 10^{-5}\,\text{eV}$$

$$kT = 8.6 \times 10^{-5}\,\text{eV/°K} \times 300°\text{K} = 2.6 \times 10^{-2}\,\text{eV}$$

De modo que

$$\frac{\mu B}{kT} = \frac{5.8 \times 10^{-5}\,\text{eV}}{2.6 \times 10^{-2}\,\text{eV}} = 2.2 \times 10^{-3}$$

Por lo tanto, la suposición $\mu B \ll kT$ es completamente válida para las temperaturas y campos ordinarios, μB viene siendo alrededor de 0.2% de kT en este ejemplo. En la práctica, la región de saturación de la figura 14-6 se alcanza a temperaturas más bajas en vez de campos intensos. b) Estimar para este caso la susceptibilidad paramagnética en un sólido que tiene $n = 2.0 \times 10^{28}$ momentos/m^3, que es un valor típico para substancias con un electrón no apareado por átomo.
Cuando $\mu B \ll kT$ se tiene de (14-6):

$$\chi = \frac{\mu_0 n \mu^2}{kT}$$
$$= \frac{4\pi \times 10^{-7}\,\text{tesla-m/}A \times 2.0 \times 10^{28}/\text{m}^3 \times (9.3 \times 10^{-24}\,\text{joule/tesla})^2}{1.38 \times 10^{-23}\,\text{joule/°K} \times 300°\text{K}}$$
$$= 5.2 \times 10^{-4}$$

El resultado es una estimación ya que la teoría utilizada es aproximada, puesto que desprecia las interacciones entre los electrones. Los valores medidos para la mayoría de las substancias paramagnéticas son algo menores que el resultado obtenido. ◀

Se ha encontrado que la relación de Curie deducida con anterioridad no es aplicable a los metales, aunque si lo es para los materiales paramagnéticos no metálicos. De hecho, en los metales la susceptibilidad paramagnética es mucho menor y virtualmente independiente de la temperatura. Aquí se tiene una situación similar a la de la sección 11-11 donde se buscaba entender la contribución electrónica a los calores específicos de los metales. En el análisis que condujo a (14-6), se utilizó la distribución clásica de Boltzmann, que fue válida puesto que los electrones estaban asociados con átomos diferentes y se podían distinguir por su localización, pero en los metales se deberá de utilizar la distribución de Fermi ya que los electrones se comportan en este caso como un gas de Fermi de partículas indistinguibles. Cuando se hizo esto se obtuvo una susceptibilidad menor que la anterior y resultó independiente de la temperatura tal como se ha explicado.

En la figura 14-7*a* se muestra la gráfica de la distribución de energía de los electrones en un metal, los estados de energía que corresponden a los momentos dipolares de spin alineados antiparalelos al campo se han representado por encima del eje de energía mientras que los que corresponden a los momentos alineados paralelamente al campo se han graficado por debajo del eje. Aquí se supone que el campo B está muy próximo a cero. Cuando se incrementa B, el primer efecto es que la energía de los electrones se corre, la energía se eleva por μB para los momentos antiparalelos y disminuye por μB para los momentos paralelos, tal como se muestra en la figura 14-7b. A continuación algunos electrones efectúan transiciones desde los estados de mayor energía (antiparalelos) a los estados de menor energía, alcanzándose una situación de equilibrio con un mínimo de energía total que se muestra en la fig. 14-7c. En el ejemplo 14.3 se ha visto que $\mu B \simeq 10^{-4}$ eV para $B = 1.0$ tesla, que es un corrimiento en energía muy pequeño comparado con la energía de Fermi $\mathscr{E}_F \simeq 1$ eV. Por lo tanto, el número de electrones con momentos paralelos es sólo ligeramente mayor que aquellos con momentos antiparalelos, dominando el caótico efecto térmico, de modo que la susceptibilidad deberá tener

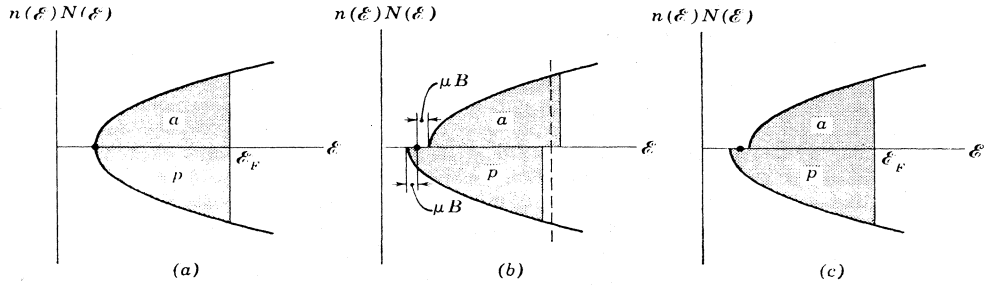


FIGURA 14-7
La distribución de electrones en un metal; los electrones ocupan los estados indicados por las áreas sombreadas. Estados con momentos magnéticos dipolares de spin antiparalelos al campo aplicado se grafican por encima del eje de energía y los estados con momentos paralelos al campo se grafican por encima del eje de energía y los estados con momentos paralelos al campo se grafican por debajo. (a) El campo aplicado es esencialmente cero. (b) La situación inmediatamente después de que el campo se incrementó hasta el valor B. (c) Situación de equilibrio con el campo aplicado B. En estos diagramas la energía de interacción magnética está muy exagerada con relación a la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$.

un valor pequeño. Además, no debería esperarse que la situación fuera sensible a cambios razonables en temperatura ya que la susceptibilidad sería prácticamente independiente de la temperatura tal como se observa experimentalmente para los metales.

14.4 Ferromagnetismo

El ferromagnetismo es una magnetización espontánea en regiones pequeñas de un material y que existe aún en ausencia de un campo de inducción externa. Resumiendo los principales hechos conocidos del ferromagnetismo. Primero, la magnetización espontánea en materiales ferromagnéticos varía con la temperatura. La magnetización es un máximo para $T = 0°$ K y cae a cero para una temperatura T_C, llamada la *temperatura ferromagnética de Curie* como se muestra en la figura 14-8. Segundo, a temperaturas mayores que T_C los materiales se hacen paramagnéticos y tienen una susceptibilidad magnética que está dada por la relación $\chi = C/(T - T_C)$ que es una modificación de la relación de Curie para materiales paramagnéticos, en la cual χ no está definida para temperaturas menores que T_C donde el material tiene una magnetización permanente. Tercero, un material feerromagnético no se magnetiza en la misma dirección a lo largo de todo su volumen, pero tiene muchas regiones más pequeñas de magnetización de dirección uniforme, llamadas dominios, que están orientadas al azar cada una sobre la otra. Finalmente, los únicos elementos ferromagnéticos son: hierro, cobalto, niquel, gadolinio y disprosio. Existe una teoría cuántica del ferromagnetismo que puede explicar todas estas propiedades observa-

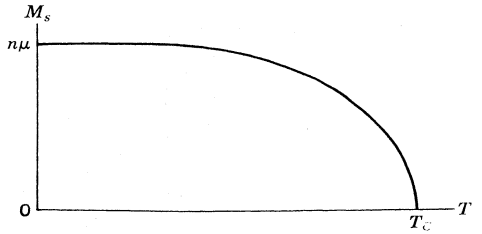


FIGURA 14-8
La magnetización espontánea M_s en función de la temperatura T en un material ferromagnético. T_C es la temperatura de Curie ferromagnética.

das, pero antes de abordarla, se mostrarán en el ejemplo que sigue que una explicación clásica simple, que se sugiere por ella misma, no es suficiente.

Ejemplo 14-4. El campo de inducción producido por un dipolo magnético de momento μ a lo largo de una línea paralela a su propio eje está dada por $B = \mu_0\mu/2\pi x^3$, donde x es la distancia medida desde el dipolo. Calcular la energía de interacción de los átomos de fierro, con sus momentos magnéticos dipolares paralelos y colineales $\mu = 2.2$ magnetones de Bohr separados por espacios interatómicos en el fierro, 3 Å. A continuación, evalúe la temperatura por la cual la energía de interacción magnética es igual a la energía térmica, para demostrar que esta interacción clásica de dipolo-dipolo no explica el ferromagnetismo en el hierro.

La energía de interacción cuando un dipolo se alinea en un campo producido por otro dipolo, es negativo (de enlace) y de magnitud

$$E = \frac{\mu_0\mu^2}{2\pi x^3} = \frac{4\pi \times 10^{-7}\ \text{tesla-m/}A \times (2.2 \times 9.3 \times 10^{-24}\ \text{joule/tesla})^2}{2\pi \times (3 \times 10^{-10}\text{m})^3}$$
$$= 3.1 \times 10^{-24}\ \text{joule}$$

Igualando esta energía a la energía térmica kT, y resolviendo para T, se encuentra

$$T = \frac{E}{k} = \frac{3.1 \times 10^{-24}\ \text{joule}}{1.38 \times 10^{-23}\ \text{joule/°K}} = 0.22°\text{K}$$

La temperatura es muy baja debido a que la energía de interacción de dipolo-dipolo es muy pequeña. A la temperatura ambiente, la energía térmica es tres órdenes de magnitud mayor y la tendencia aleatoria de la agitación térmica destruiría completamente la tendencia de la interacción dipolo-dipolo a alinear los momentos dipolares magnéticos individuales y a producir una magnetización grande. Sin embargo, en realidad este alineamiento se encuentra en el fierro a la temperatura ambiente debido a que éste es ferromagnético a esta temperatura. Por lo tanto, se concluye que la explicación de ferromagnetismo no puede ser la interacción dipolo-dipolo clásica. ◀

Para mostrar la teoría cuántica del ferromagnetismo se considerará el hierro, cobalto o níquel, los cuales son elementos de transición que tienen parcialmente llena las subcapas internas *3d*. Los números cuánticos m_l y m_s para los electrones *3d* en un átomo de un ferroimán que contiene esos átomos, tendrán aquellos valores que minimicen la energía de los sistemas ferromagnéticos y que sean consistentes con los requisitos del principio de exclusión. Así, por ejemplo, si la componente z de los números cuánticos m_l del impulso angular orbital de dos electrones *3d* tienen los mismos valores, las componentes z de los números cuánticos m_s de impulso angular de spin deberán tener signos opuestos. Si los valores m_l son distintos, los valores m_s pueden ser el mismo, lo cual significa que los spin pueden ser esencialmente paralelos. Ahora bien, el factor g que especifica la relación del momento magnético dipolar total al impulso angular total tiene un valor para materiales ferromagnéticos cercano al valor $g = 2$ que corresponde al spin del electrón (véase sección 10-6, particularmente (10-23)). Esto indica que la magnetización se debe al "paralelismo" de los spin en vez de a los momentos magnéticos dipolares orbitales. Por lo tanto, los electrones en la subcapa *3d* de un átomo de hierro se alinean entre ellos mismos de modo que los spin son esencialmente paralelos. La razón es que esto reduce la energía del átomo. Esto es, dos electrones *3d* permanecerán, en promedio, más alejados si sus spin son "paralelos" que si son antiparalelos, y si están más alejados, su energía de repulsión de Coulomb se reduce. Esta es justamente la tendencia (véase sección 10-4) para los spin en una subcapa no llena a acoplarse "paralelos" y maximizar el spin total, hasta donde lo permita el principio de exclusión, ya que esto minimiza la energía residual de Coulomb. Por lo tanto, un sólo átomo de hierro es paramagnético ya que tiene un momento magnético dipolar de spin permanente, debido básicamente a la interacción entre las coordenadas de spin y las coordenadas espaciales impuesta por los requisitos mecánicos cuánticos concerniente al intercambio de marcas de las partículas indistinguibles. Por esta razón, algunas veces se dice

que el acoplamiento de spin se debe a la fuerte *interacción de intercambio* que opera dentro del átomo.

Enseguida se considerará una red cristalina de átomos de hierro. También existe una fuerte interacción de intercambio entre átomos adyacentes de la red debido a que los electrones en los átomos son indistinguibles y los átomos están lo suficientemente próximos entre sí como para que la indistinguibilidad establezca una diferencia. Esta interacción de intercambio también conducirá a un acoplamiento de los spin, es decir, los spin totales de átomos adyacentes, pero es más complicada que la interacción de intercambio dentro de un solo átomo debido a que la geometría del sistema de átomos es más complicada que la geometría esféricamente simétrica de uno solo. Los resultados de interacción de intercambio pueden ser que la energía más baja del sistema ocurra cuando los spin de los pares de átomos adyacentes sean "paralelos" o que ocurran cuando éstos sean "antiparalelos". En el primer caso, el sistema será ferromagnético y en el segundo será antiferromagnético.

El ferromagnetismo se puede entender considerando los cinco traslapes de las bandas de energía *3d* de un cristal compuesto por uno de los átomos de los elementos de transición. La totalidad de estas bandas, que aquí se llamará banda *3d*, pueden contener 10 electrones por átomo. Cuando la banda está llena, tiene cinco electrones con spin para arriba y cinco con spin para abajo. Por átomo, la banda es estrecha debido a que la subcapa *3d* es una subcapa interna, tal como se estudió en la sección 13-7. Sin embargo, en los átomos ferromagnéticos la banda *3d* solamente está parcialmente llena. Por ejemplo en el fierro existen seis electrones *3d* por átomo. Si inicialmente se supone que tres de estos electrones tienen spin con una orientación y los otros 3 con la otra, los electrones ocuparían los estados de energía más baja disponible en cada una de las dos *bandas parciales* de spin opuesto, no se podrá estar seguros que éste sea el estado de energía más bajo para el sistema, ya que la interacción de intercambio de la red corren a las bandas parciales de signo opuesto con respecto a las otras. La banda parcial de un spin, es decir, la colección de niveles de energía en la cual todos los electrones tienen una orientación de spin, será disminuida en energía por la interacción de intercambio y la banda parcial del otro spin será aumentada en energía por la interacción. Se podrían tener 5 electrones por átomo en una banda parcial y el sexto en la banda parcial del spin opuesto. Si la energía total del sistema se disminuyera más por la interacción de intercambio que lo que se eleva por la mayor energía que resulta de la población asimétrica de los niveles de energía de electrones entre las dos bandas parciales. Esto es, compitiendo con la tendencia de los electrones de irse a la banda parcial de menor energía, está el hecho de que, si lo hacen, algunos se verán forzados por el principio de exclusión a irse a los niveles de energía superiores de la banda parcial. Enseguida se presentará una figura que muestra, y aún explica esta competencia.

Los cálculos demuestran que para unos pocos elementos una banda parcial efectivamente se llenará mientras que la otra no, de modo que en ellos existirá una gran magnetización espontánea. Cuando se calcula la interacción entre spin como una función de la razón entre la mitad de la separación internuclear y el radio de la capa *3d* en los elementos de transición, se encuentra que el alineamiento de spin paralelos se ve favorecido si esta razón excede a 1.5. Los valores típicos de la razón son Mn 1.47; Fe, 1.63; Co, 1.82; Ni, 1.98; de modo que se espera que sean ferromagnéticos fierro, cobalto y níquel y que el manganeso no lo sea. De hecho, los cristales de manganeso no son ferromagnéticos. La teoría se confirma por el hecho de que ciertos compuestos (tales como las aleaciones Heusler) que contiene átomos de manganeso que están muy alejados *son* ferromagnéticos.

En la figura 14-9 se hace la gráfica de la diferencia de energía entre configuraciones magnetizadas y no magnetizadas contra la razón de la semiseparación internuclear al radio *3d*. Conforme la separación entre los átomos aumenta desde el valor que da el máximo, las funciones de onda *3d* se traslapan cada vez menos y los requisitos de indistinguibilidad desaparecen rápidamente; por lo tanto, la interacción de intercambio reduce la energía cada vez menos. Si en una red cristalina los radios de la subcapa de los electrones de valencia son pequeños comparados con el espaciamiento internuclear, como en los elementos de las tierras

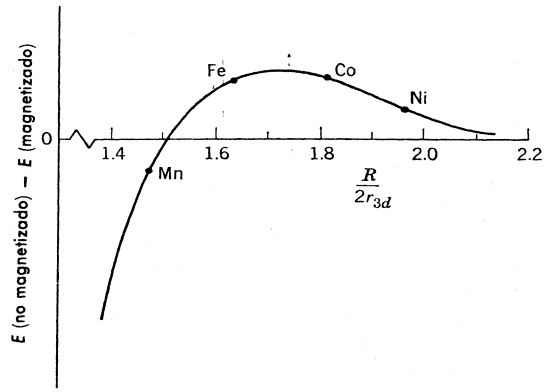


FIGURA 14-9
La variación de la diferencia de energía entre configuraciones nomagnetizadas y magnetizadas con la razón de la separación internuclear al diámetro de la subcapa *3 d*, para algunos elementos de transición.

raras, se espera que el material sea paramagnético debido a que los momentos magnéticos dipolares de spin individuales están aislados unos de otros. Conforme la separación entre los átomos disminuye del valor que da el máximo, las bandas de energía se ensanchan y el exceso de energía asociado con la población asimétrica en el estado de magnetización se incrementa más de lo que la interacción de intercambio reduce la energía. De hecho, nos aproximamos a la situación de las moléculas diatómicas en las que los spin antiparalelos dan la energía más baja ya que los electrones gastan la mayor parte de su tiempo entre los núcleos. En los elementos con electrones de valencia en las subcapas no llenas, el radio de la subcapa es lo bastante grande comparado con la separación internuclear como para esperar que todos estos electrones formen pares con spin "antiparalelos". Entonces no existirá momento magnético dipolar de spin y el material será diamagnético. La figura 14-10 ilustra esquemáticamente la población de dos bandas parciales de signo opuesto, para separación internuclear menor que, igual a y mayor que el intervalo de valores que conduce al ferromagnetismo.

Se ve que la situación ferromagnética es una de las más delicadas en la cual el radio de la subcapa de valencia es lo suficientemente grande como para permitir un traslape espacial suficiente compatible con los requisitos de indistinguibilidad, pero al mismo tiempo lo suficientemente pequeña como para prevenir que el ancho de la banda de valencia sea excesivo. En estos casos en los cuales el estado de magnetización se favorece, la diferencia de energía entre los estados magnetizados y no magnetizados es del orden de un décimo de electrónvolt por átomo. Asi, esta situación deja en claro que la magnetización espontánea es dependiente de la temperatura y que la energía térmica adicional queda disponible gracias a un incremento en la temperatura que puede eliminar las condiciones que favorecen el alineamiento del spin causante del ferromagnetismo. A $T = 0°K$ todos los alineamientos del spin permitidos existen, pero conforme la temperatura se eleva, muchos de los alineamientos paralelos se distribuyen al azar por el movimiento térmico. Justamente por debajo de la temperatura de Curie T_C, los alineamientos desaparecen rápidamente (véase figura 14-8) y esto tiende por completo a irse por encima de la temperatura T_C. Para el fierro la temperatura de Curie es 1043°K para el cobalto es 1400°K y para el níquel 631°K.

Queda por explicar el origen de los dominios. En los materiales ferromagnéticos no se observa que sean magnetizados a menos que se les ponga previamente en un campo magnético externo. Es decir, que a menos que exista magnetización espontánea, la magnetización en una región pequeña, o *dominio*, de un material ferromagnético se puede orientar en una dirección diferente a la que tiene en otro dominio, de modo que la magnetización microscópica resultante puede ser cero. Los dominios aparecen en primer lugar debido a que la energía de un cristal grande no es un mínimo cuando éste se encuentra magnetizado uniformemente. El tamaño y formas particulares de un dominio están determinados por un proceso que minimiza el total de los tres

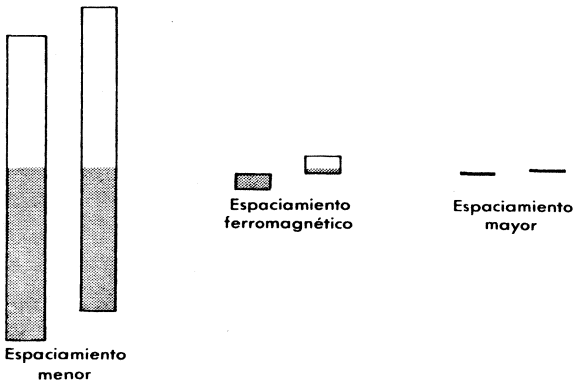
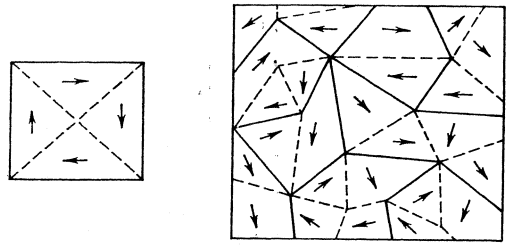


FIGURA 14-10
Ilustración esquemática de la estructura de la banda de valencia para tres espaciamientos internucleares diferentes de un sistema de átomos que son individualmente paramagnéticos. Con el decremento del espaciamiento, las funciones de onda de los electrones en las subcapas de valencia de átomos adyacentes se traslapan y tienen lugar efectos de intercambio. Estos causan que el nivel de valencia se desdoble en una banda y, desde el punto de vista de la banda, se descompone en dos bandas parciales de spin alineados en oposición, también causan que las bandas parciales se desplacen entre sí. La posibilidad del ferromagnetismo aflora debido a que, en un caso favorable como el que se muestra, al decrecer el espaciamiento, el desplazamiento se incrementa tan rápido como disminuye el ancho de la banda. Esta relación no se mantiene en espaciamientos muy pequeños ya que el ancho de la banda aumenta más y más rápido con el decremento del espaciamiento (ver figura 13-3). Para todos los espaciamientos, los niveles de las dos bandas parciales se ocuparán de tal modo, que las energías de Fermi sean iguales, ya que esto minimiza la energía total del sistema. Para la situación descrita por la figura central, el número de electrones de valencia en la banda total es suficiente para llenar completamente todos los niveles de la banda parcial de spin más bajo, pero sólo los niveles más bajos de la banda parcial superior. Entonces, el sistema es ferromagnético ya que la mayoría de los spin de los electrones de valencia están alineados en la misma dirección. Esto no ocurre en la figura de la derecha debido a que las energías asociadas con ambos efectos de intercambio son pequeñas comparadas con kT. En la figura de la izquierda esto no sucede porque el ancho de la banda es grande comparado con los desplazamientos parciales de la banda. Entonces el ferromagnetismo requiere no sólo que exista un intervalo de traslape de las subcapas de valencia donde los dos efectos de intercambio tengan una relación particular, sino también que la rotación entre el espaciamiento internuclear y el diámetro de la subcapa de valencia sea tal, que el traslape en el sistema real sea en este intervalo.

tipos diferentes de energía involucrados. Primero la energía del campo magnético. Si, por ejemplo, el espécimen sólido completo formara un solo dominio existiría un campo externo intenso y una energía magnética grande asociada con el campo. El campo magnético externo se puede reducir bastante y, consecuentemente, disminuir la energía en él, dividiendo el espécimen en dominios cuyas magnetizaciones tiendan a cancelarse entre sí como se muestra en la figura 14-11. Sin embargo, las fronteras del dominio o paredes, son sitios de campos magnéticos no uniformes altamente localizadas y de intensidad considerable y que requieren para su creación un segundo tipo de energía. La tercera energía es la diferencia de energía entre una situación en la que el espécimen está magnetizado en una dirección relativa al eje del cristal y una situación en la cual está magnetizado en otra dirección.



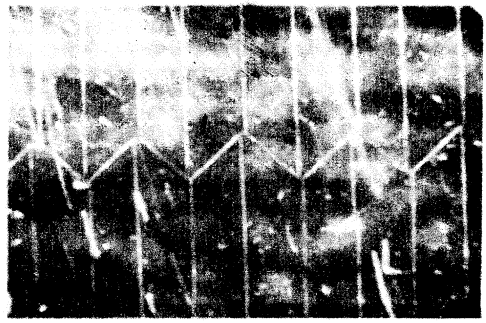
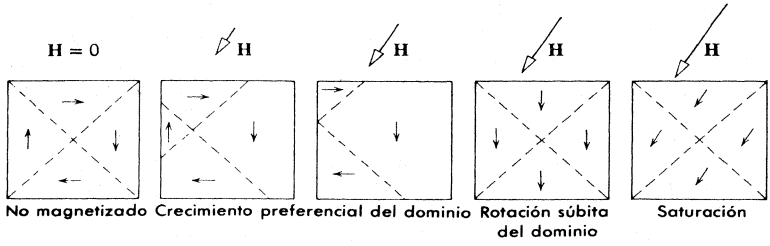


FIGURA 14-11
Dominios ferromagnéticos. *Izquierda Arriba:* En un monocristal los vectores de magnetización deberán de estar a lo largo de ejes equivalentes del cristal. Este cristal no tiene magnetización neta, no obstante que cada uno de los dominios está magnetizado. *Arriba derecha:* En una substancia policristalina los ejes del cristal están orientados aleatoriamente de manera que los vectores de magnetización están orientados aleatoriamente. *Abajo:* Patrones de dominios para un monocristal de hierro conteniendo 3.8% de sílice. Las líneas blancas muestran las fronteras entre los dominios (cortesía de H. J. Williams. Bell Thelephone Laboratories).



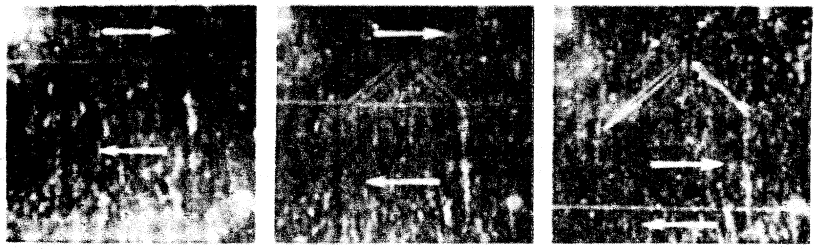


FIGURA 14-12
Arriba: Crecimiento de dominios en un monocristal en un campo magnético externamente aplicado **H**, se muestra esquemáticamente el crecimiento preferencial de los dominios, la rotación de éstos y la saturación. *Abajo:* Campo magnético externamente aplicado dirigido hacia la derecha. En cada dominio se muestra la magnetización por flechas blancas. La frontera del dominio se mueve hacia abajo a través de una región en la cual existe una imperfección en el cristal como crecimiento preferencial del dominio. (cortesia A. J. William, Bell Telephone Laboratories).

En una pieza de fierro no magnetizada, los dominios individuales entre los cuales los momentos dipolares magnéticos están alineados, están orientados al azar. Conforme se magnetiza el fierro colocándolo en un campo magnético externo, ocurren dos efectos. Uno es el crecimiento en tamaño de los dominios que son favorecidos a orientarse con respecto al campo a expensas de aquellos que no lo son, tal como y se muestra en la figura 14-12. El otro es una rotación de la dirección de magnetización dentro de un dominio hacia la dirección del campo aplicado. El bien conocido efecto de *histéresis* en el cual la magnetización de los materiales ferromagnéticos no vuelve a cero después de quitar el campo externo aplicado se debe al hecho de que las fronteras de dominio no regresan completamente a sus posiciones originales cuando se quita el campo externo. El movimiento de estas fronteras no es reversible y se ve afectado por imperfecciones en el cristal tales como impurezas y esfuerzos. El material continúa magnetizado a pesar de que no exista campo aplicado externamente. Una condición denominada *magnetismo permanente.*

14.5 Antiferromagnetismo y ferromagnetismo

Otros dos tipos de magnetismo íntimamente relacionados con el ferromagnetismo son el *antiferromagnetismo* y el ferrimagnetismo. En los materiales *antiferromagnéticos*, de los cuales el MnO_2 es un ejemplo, las fuerzas de interacción de intercambio entre átomos adyacentes tienen orientaciones de spin "antiparalelas", como se muestra en la figura 14-13b. Por ejemplo, en el MnO_2, el ion de oxígeno, que es negativo, tiene a cada lado un ion de magnaneso que es positivo; los momentos dipolares magnéticos de los iones positivos están esencialmente antiparalelos debido a que cada uno está apareado con uno de los spin electrónicos del ion oxígeno orientados en dirección opuesta y que se encuentra en la configuración de mínima energía del sistema. Por lo tanto, esos materiales muestran un magnetismo externo muy pequeño. Si se les calienta lo suficiente, los materiales se hacen paramagnéticos y la interacción de intercambio deja de actuar. En las sustancias *ferromagnéticas* están presentes dos tipos distintos de iones paramagnéticos; en la ferrita de níquel los dos iones son Ni^{++} y Fe^{+++}. La interacción de intercambio fija a los iones en una configuración como la que se muestra en la figura 14-13c. La interacción de intercambio que alinea los momentos magnéticos dipolares "antiparalelos" también existe, pero ya que están presentes los iones con dos diferentes magnitudes de momentos dipolares magnéticos, la magnetización neta no es cero. Los efectos magnéticos externos son intermedios entre el ferromagnetismo y antiferromagnetismo y aquí también la interacción de intercambio desaparece si se calienta el material por encima de cierta temperatura crítica. Las ferritas son cristales que tienen conductividad eléctrica pequeña

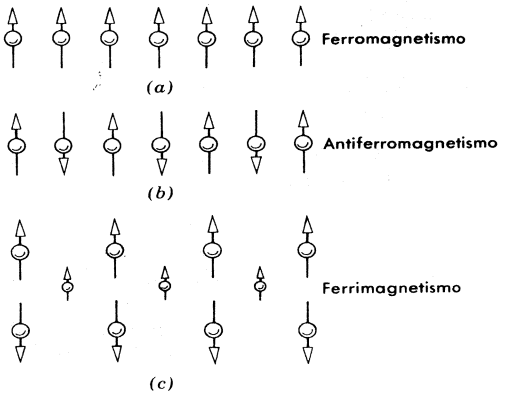


FIGURA 14-13
Se muestra como se orientan los dipolos magnéticos elementales por la interacción de intercambio interatómico en (a) ferromagnetismo, (b) antiferromagnetismo y (c) ferrimagnetismo.

comparada con los materiales ferromagnéticos y son muy útiles en situaciones de alta frecuencia debido a la ausencia de pérdidas significativas por corrientes de eddy.

PREGUNTAS

1. ¿Por qué las corrientes de superconductividad fluyen sobre la superficie de un superconductor?
2. ¿Por qué en el interior de un superconductor el campo eléctrico es cero?
3. La conductividad perfecta requiere que el campo magnético interno de un cuerpo sea cero. ¿Qué es lo que requiere del campo magnético interno?
4. ¿Cómo se podría medir el campo crítico de un superconductor como función de la temperatura?
5. El campo magnético externo crítico en el cero absoluto varía con el material como $M^{-1/2}$. Explique.
6. A partir del hecho de que a temperatura ambiente la conductividad eléctrica del aluminio es mucho mayor que la del plomo, ¿podría usted decir si el plomo o el aluminio tienen la temperatura crítica de superconductividad mayor?
7. Una película superconductora se puede usar como un bolómetro. (Un instrumento para medir la radiación calorífica). Explique.
8. En un par de Cooper, ¿qué tanto pueden alejarse dos electrones si se les piensa atados a los extremos de de un resorte? ¿Qué propiedad del sistema constituye el resorte?
9. ¿Cuál es exactamente la diferencia entre los estados de energía de un electrón en un superconductor y los estados de energía del superconductor mismo?
10. ¿Existen analogías entre superconductividad y superfluidez?
11. Los superconductores cuyos pares de Cooper son lo suficientemente pequeños para permitir la existencia de campos magnéticos portadores de canales también tienen temperaturas críticas relativamente altas. ¿Cuál es la razón para este comportamiento tan conveniente de los superconductores tipo II?
12. Analizar el uso como termómetro de una sustancia paramagnética. ¿En qué intervalo de temperatura sería útil?
13. En un gran contraste con la situación paramagnética, la magnetización inducida en una esfera diamagnética mediante un campo magnético externo no varía con la temperatura. Haga esto posible.
14. El movimiento orbital de un electrón contribuye al comportamiento paramagnético del átomo, o solamente lo hace el spin intrínseco del electrón.
15. La susceptibilidad paramagnética de las tierras raras, generalmente es mayor que la de los elementos de transición. Tome en cuenta la estructura de capas electrónicas y explique el por qué.
16. ¿En el análisis del paramagnetismo es justificable el despreciar el momento dipolar magnético del spin nuclear? Explique.
17. A partir del hecho de que la mayoría de las moléculas orgánicas tienen momentos magnéticos dipolares de menos que unos cuantos magnetones de Bohr, demuestre que los procesos vitales no pueden afectarse por campos magnéticos de los producidos en un laboratorio.
18. ¿Por qué los elementos ferromagnéticos provienen de la mitad del grupo de los elementos de transición o de la mitad de las tierras raras, en vez de provenir de los extremos de los grupos respectivos?

19. El cobre tiene una subcapa electrónica $3d$ llena y un electrón de valencia $4s$. Explique por qué no esperaría usted que fuera ferromagnético.

20. En los materiales ferromagnéticos por qué no está definida la susceptibilidad para temperaturas menores que la temperatura de Curie.

21. Las configuraciones electrónicas del gadolinio y del disprosio son consistentes con el hecho de que éstos sean materiales ferromagnéticos? Explique.

22. ¿Por qué la interacción de intercambio puede tener un efecto significativo sobre una banda estrecha con una alta densidad de estados (como en la banda $3d$ de los elementos de transición) no obstante que la energía de interacción es pequeña?

23. Se coloca un clavo sobre una mesa lisa y próximo a un imán potente se lo suelta y es atraido por el imán. ¿Cuál es la fuente de la energía cinética que tiene el clavo justo antes de que pegue en el imán?

24. ¿Por qué para imanes permanentes se utilizan materiales compuestos por pequeños cristales y que tienen grandes imperfecciones? ¿Por qué para imanes de transformadores se utilizan materiales compuestos por cristales grandes y que tienen pocas imperfecciones?

PROBLEMAS

1. (a) Demuestre, mediante las ecuaciones de Maxwell, que la resistividad (conductor perfecto) implica que $\mathbf{B}$ = constante en el interior del material. (b) Demuestre mediante las ecuaciones de Maxwell que $\mathbf{B} = 0$ en el interior del material (superconductor) implica que la resistividad del material es $\rho = 0$.

2. Demuestre a partir de la ley de Lenz que el efecto Meissner implica conductividad perfecta, pero que conductividad perfecta no implica el efecto Meissner.

3. El punto crítico del estaño a 2°K es 0.02 weber/m^2. Haga una gráfica de la magnetización a 2°K para una muestra larga y delgada de estaño como una función del campo aplicado.

4. En la figura 14-14 se muestra parte del diagrama de $\mathscr{E}$ en función de k para los electrones en un superconductor. (a) Haga una curva de la densidad de electrones como función de $\mathscr{E}$ para un superconductor a T-O°K (b) haga una gráfica de la energía necesaria para colocar agujeros en un estado de superconductor y electrones en el estado normal. Esta es una gráfica de $(\mathscr{E} - \mathscr{E}_F)$ en función de k; $\mathscr{E}_F$ está en el centro de la brecha para un superconductor.

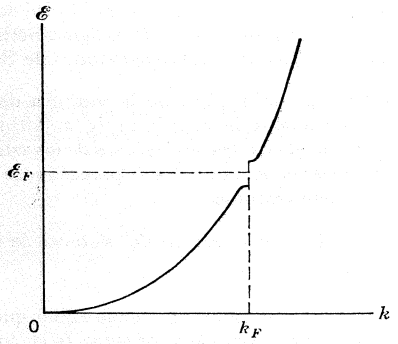


FIGURA 14-14
La energía como función del número de onda positivo para un superconductor.

5. Cuando dos metales están separados por un aislador muy delgado, los electrones desde un metal pueden "tunelar" a través del aislador hasta el otro metal. Los electrones fluyen hasta que los niveles

de Fermi de los dos metales se igualan. Cuando entre los dos metales se conecta una batería como se muestra en la figura 14-15, los niveles de Fermi se desplazan y fluye una corriente siempre que existan niveles electrónicos llenos en un metal, en contraposición con niveles vacíos en el otro. Haga una gráfica de voltaje-corriente característicos para las siguientes uniones (a) metal normal-metal normal. (b) metal normal-superconductor. (c) superconductor-superconductor. (Sugerencia: La energía de Fermi de un superconductor se encuentra en el centro de la brecha de energía).

6. Use la ley de inducción de Faraday para demostrar que un agujero en un superconductor atrapará flujo magnético, es decir, $dB/dt = 0$ en el agujero. Recuerde que el campo eléctrico $E = 0$ en cualquier circuito a través del superconductor que encierre el agujero y que también el efecto Meissner no es aplicable al agujero.

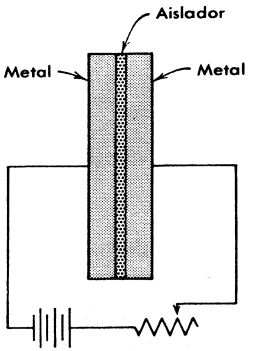


FIGURA 14-15
Circuito considerado en el problema 5.

7. Derivar (14-4) para la magnetización, utilizando (14-2) y (14-3).

8. Demuestre de (14-2) y (14-3) que $\chi = -1$ para un superconductor. ¿Este resultado concuerda con (14-4)?

9. Calcular la magnetización de un mol de oxígeno a temperatura y presión normales en el campo magnético de la tierra. La susceptibilidad del oxígeno es 2.1×10^{-6} y el campo magnético terrestre es 5×10^{-5} tesla. (b) ¿Cuál es la magnetización de saturación de un mol de oxígeno? Su momento magnético dipolar es 2.8 magnetones de Bohr.

10. Calcular la temperatura de la muestra del ejemplo 14-3 cuando el campo magnético se reduce isentrópicamente de un tesla a 1°K a 0.01 tesla, suponiendo la ley de Curie. (Un proceso isentrópico es aquel en el cual las poblaciones de los estados no cambian. Por lo tanto la magnetización debería de permanecer constante). A este proceso se le llama *demagnetización adiabática* y es muy útil en la física a bajas temperaturas.

11. ¿Cuál es la magnetización del sistema de dos niveles estudiado en conexión con (14-5), cuando $\mu B \gg kT$?

12. A partir de la figura 14-7 se puede argüir que la magnetización debida a los electrones de conducción deberá ser proporcional al número de electrones dentro de la energía de Fermi. (a) Demuestre que esto conduce a que la susceptibilidad esté dada aproximadamente por

$$\chi = \frac{3N_0\mu_b^2}{2kT_F}$$

donde N_0 es el número de Avogadro, μ_b es el magnetón de Bohr y T_F es la temperatura de Fermi. (b) Evalúe χ para el cobre.

13. (a) Demostrar que el calor específico para campo constante c_H para el sistema de dos niveles estudiado en conexión con (14-5), está dado por

$$c_H = \frac{\mathcal{N}k\left(\frac{2\mu B}{kT}\right)^2 e^{2\mu B/kT}}{(e^{2\mu B/kt}+1)^2}$$

14. Un ferroimán se puede considerar similar a un paramagneto a excepción de que existe un campo molecular interno H_W que tiende a alinearlo espontáneamente con los dipolos elementales (a) El material se magnetizará espontáneamente cuando la energía de interacción entre el dipolo y el campo molecular es igual a kT_C. Calcular el valor de H_W para el fierro donde el momento magnético es 2.2 magnetones de Bohr y T_C es 1000° K. (b) ¿Cuál es la magnetización de una muestra de 1 cm² de fierro que tiene un solo dominio?(densidad 7.9 g/cm³; peso atómico = 56) (c) ¿Cuál es la energía en el campo?

15. El campo molecular del problema 14 se puede tomar como proporcional a la magnetización de la muestra, de modo que $H_W = \lambda M$. (a) Demuestre que esto conduce a una susceptibilidad dada por

$$\chi = \frac{C}{T - T_C}$$

donde $T_C = C\lambda$. (b) Calcular el valor de λ para el fierro.

16. Un modelo simple de antiferromagneto es una red de dos tipos de iones paramagnéticos tales, que los vecinos próximos de los átomos A son átomos B. Si las interacciones antiferromagnéticas son solamente entre vecinos próximos, la magnetización de la muestra por encima del punto de Curie se puede escribir como

$$TM_A = C'(H - \lambda M_B)$$

y

$$TM_B = C'(H - \lambda M_A)$$

aquí C' es la constante de Curie para una subred solamente. El campo efectivo en la subred A es $H - \lambda M_B$, y λ positiva corresponde a interacciones ferromagnéticas entre átomos A y B. Demuestre que esto conduce a una susceptibilidad por encima de T_C dada por

$$\chi = \frac{C}{T + T_C}$$

donde $C = 2C'$ y $T_C = C'\lambda$.

17. Haga esquemas de curvas de χ^{-1} contra T para $T > T_c$ para (a) un paramagneto, (b) un ferromagneto y (c) un antiferromagneto y analice el significado de la intersección con eje T.

15

Modelos nucleares

15.1 Introducción **585**

Papel de los modelos; comparación entre las escalas de energía atómica y nuclear.

15.2 Generalidades sobre algunas propiedades nucleares **587**

Información previamente introducida e información nueva respecto a las masas, cargas, radios, momentos dipolares magnéticos, spin, simetría y momentos cuadrupolares eléctricos nucleares; fuerzas nucleares y su carácter fuerte, atractivo, de corto alcance, independiente de la carga; los neutrones como constituyentes nucleares.

15.3 Dimensiones y densidades nucleares **591**

Medidas por dispersión de electrones de las distribuciones de carga nucleares; densidad de carga; radios correspondientes a la mitad del valor; espesor de la superficie; valores similares de la densidad de masa interior para todos los núcleos.

15.4 Masas nucleares y sus abundancias **595**

Espectrometría de masas; unidad de masa; isótopos; balance de energía en reacciones; relaciones del valor Q; resultados de las determinaciones de masas; deficiencias de masa; energía de enlace por nucleón y su valor aproximadamente constante para casi todos los núcleos; saturación; fisión; fusión; relación entre los valores estables de N y Z; tendencia para N par y Z par.

15.5 El modelo de la gota **604**

Relación entre los valores universales de la densidad de masa interior y la energía de enlace por nucleón con las propiedades de una gota; argumentos clásicos para los términos de volumen, superficie y de Coulomb de la fórmula de masa; introducción de los términos de asimetría y paridad; parámetros; uso de la fórmula para predecir la energía de enlace de los neutrones; determinación del parámetro del término volumétrico por la teoría de Brueckner.

15.6 Números mágicos 607

Evidencia experimental; analogía con la física atómica; dificultades aparentes en considerar el movimiento de partículas independientes.

15.7 Modelo del gas de Fermi 609

Potenciales nucleares netos; producción del movimiento de partículas independientes por el principio de exclusión; estimación de la energía de Fermi; origen de los términos de asimetría en la fórmula para la masa.

15.8 Modelo de capas 612

Relación con la teoría de Hartree; eigenfunciones; número cuántico de nodo radial n; ordenamiento de los niveles de energía de acuerdo con n y l; potenciales centrífugos; construcción de núcleos a partir del principio de exclusión, falla para explicar números mágicos mayores; introducción de interacción spinórbita, fuerte, invertida.

15.9 Predicciones del modelo de capas 618

Spin en o cerca de los números mágicos; acoplamiento JJ; interacción atractiva residual; tendencia de apareamiento antiparalelo; origen del término de apareamiento en la fórmula para la masa; spin y paridad de núcleos con A impar o A par, con N y Z pares, núcleos con A par con N y Z impar; dificultades con los momentos dipolares magnéticos.

15.10 Modelo colectivo 622

Potenciales nucleares netos deformables describiendo movimientos colectivos; predicción satisfactoria de los momentos dipolares magnéticos; dificultades del modelo de capas con los momentos cuadrupolares eléctricos y predicciones satisfactorias del modelo colectivo.

15.11 Resumen 628

Tablas de las características de los modelos nucleares.

Preguntas 629

Problemas 630

15

Modelos nucleares

15.1 Introducción

Las consideraciones de los capítulos anteriores han conducido de los átomos a los sistemas más grandes, moléculas y sólidos, de los cuales los átomos son constituyentes. Ahora la dirección es en sentido contrario, y se considerarán sistemas más pequeños, los núcleos, que son constituyentes de los átomos.

Existe una pronunciada diferencia entre el estudio teórico de los átomos y el correspondiente de los núcleos. Mucho antes de que fuera desarrollada la teoría que explica las propiedades de los átomos, ya se conocía en detalle la naturaleza básica de las fuerzas electromagnéticas que actúan sobre electrones individuales de los átomos. Sin embargo, durante la mayor parte del período en que se desarrollaba el conocimiento de las propiedades de los núcleos, se conocía muy poco acerca de los detalles de las fuerzas nucleares que actúan sobre los protones y neutrones del núcleo. A pesar de que recientemente se ha obtenido un conocimiento bastante completo de las fuerzas nucleares, resultan ser tan complicadas que aún no es posible utilizar este conocimiento para construir una *teoría* completa de los núcleos. Es decir, no es posible explicar todas las propiedades de los núcleos en términos de las propiedades de las fuerzas nucleares que actúan entre sus protones y neutrones. Sin embargo, existe cierto número de *modelos*, o teorías rudimentarias de validez restringida que pueden explicar un número limitado de propiedades nucleares, utilizando argumentos que no implican todos los detalles de las fuerzas nucleares. A pesar de que se progresa en el desarrollo de una teoría completa, los estudios introductorios acerca de los núcleos en su mayor parte comprenden el estudio de los diversos modelos nucleares. En este capítulo se tratan los modelos más importantes y se utilizan para explicar las propiedades de los núcleos en su estado base. En el capítulo 16, se utilizarán estos modelos para estudiar los núcleos en sus estados excitados y estudiar las transiciones que ocurren de modo natural entre los estados nucleares (decaimiento nuclear, incluyendo radiactividad) y las transiciones artificialmente producidas (reacciones nucleares, incluyendo fisión y fusión). Las propiedades detalladas de las fuerzas nucleares se tratan en el capítulo 17, donde se considerarán las partículas elementales que constituyen los núcleos.

Se presenta una gran diferencia entre el estudio experimental de los átomos y el estudio experimental de los núcleos, debido a la diferencia entre sus energías características. La energía característica de un núcleo es del orden de un MeV. Por ejemplo, en el capítulo 6 se vio que el potencial nuclear atractivo que se ejerce sobre un neutrón que se encuentra en un núcleo, es de varios MeV de profundidad y que la altura de la barrera de Coulomb repulsiva que separa a dos núcleos cargados positivamente también es de varios MeV. Muy pronto se verá que la energía de enlace de un protón o un neutrón en un núcleo típico, se caracteriza por ser del mismo orden de magnitud, así como la separación en energía entre el estado base y el primer estado excitado. La energía característica del átomo es de 1 eV. Debido a que ésta es tan baja (no mucho mayor que la energía térmica correspondiente a la temperatura ambiente, $kT = 0.025$ eV) los átomos se pueden excitar fácilmente y sin mucha dificultad se combinan para formar moléculas y sólidos. En los núcleos, se requieren circunstancias muy especiales para producir excitación, debido a su muy alta energía característica. Weisskopf ha descrito muy bien la situación:

"En nuestro medio ambiente inmediato, los núcleos sólo existen en su estado base; afectan el mundo en que vivimos únicamente por su carga y su masa y no por sus intrincadas propiedades dinámicas. De hecho, todos los fenómenos nucleares interesantes.....se ponen de manifiesto bajo condiciones que nosotros mismos hemos creado en máquinas aceleradoras. Es, hasta cierto punto, un mundo hecho por el hombre.

Sin embargo, no es completamente hecho por el hombre. El centro de las estrellas son regiones del universo en las que se llevan a cabo reacciones nucleares y, por lo tanto, donde la dinámica nuclear representa un papel esencial en el curso de la naturaleza. Por consiguiente, los fenómenos nucleares son la base de nuestra fuente de energía en la tierra, tanto en reactores como en el sol. Pero la física nuclear es más importante aún, en el mundo en que vivimos, desde el punto de vista de la historia del universo. La composición de la materia, como se observa en la actualidad, es el producto de reacciones nucleares que se realizaron hace mucho tiempo en las estrellas o en explosiones de estrellas, en donde las condiciones que prevalecían son las que simulamos en las máquinas aceleradoras. Por lo tanto, las bases materiales del mundo en que vivimos las constituyen las leyes de la física nuclear. La mejor forma de ilustrar la interconexión entre los hechos de la naturaleza, la estrechamente tejida red de las leyes de la física, es señalando la curva de abundancias de los elementos en nuestra parte del universo (ver la figura 15-1). Cada máximo y mínimo en la curva de abundancias, corresponde a algún truco de la dinámica nuclear, una capa cerrada por aquí, una sección eficaz grande para neutrones por allá o una baja energía de enlace. Si la

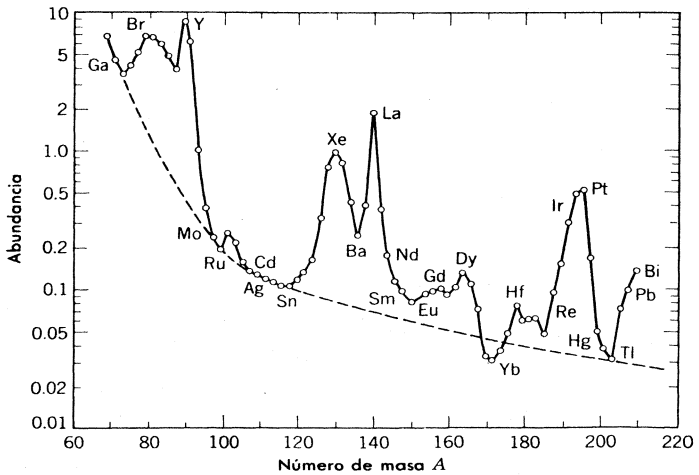


FIGURA 15-1
Abundancia relativa de los elementos. Obsérvense las fuertes fluctuaciones superpuestas a la tendencia general decreciente respecto a A creciente, el número de masa.

resonancia de 7.65 MeV en el carbono no existiera, entonces, de acuerdo con Holye y Salpeter, prácticamente no se habría formado el carbono y posiblemente nosotros no hubieramos evolucionado para contemplar estos problemas. Cada vez que sondeamos la naturaleza- ya sea estudiando la estructura de los núcleos, o aprendiendo acerca de macromoléculas, o acerca de partículas elementales, o acerca de la estructura de los sólidos - siempre obtenemos alguna parte esencial de este gran universo". (De *"Problems of Nuclear, Structure"*, por Víctor Weisskopf, *Physics Today* 14, 7, 1961).

15.2 Generalidades sobre algunas propiedades nucleares

Se empezará el estudio de los núcleos, repasando rápidamente lo que ya se ha aprendido acerca de ellos en el proceso de estudiar átomos y moléculas. Los puntos de información nueva serán considerados sólo brevemente; cada uno de ellos será estudiado más adelante con mayor detalle, a saber:

1. Ya se vio (capítulo 4) que la masa de un núcleo sólo es ligeramente menor que la masa del átomo que lo contiene. Por lo tanto, la masa nuclear es aproximadamente igual al entero A por la masa del átomo de hidrógeno o aproximadamente igual a la masa de un *protón*, el núcleo de un átomo de hidrógeno, por A. El número entero A, denominado *número de masa*, es el más cercano al peso atómico del átomo que contiene el núcleo en cuestión. Ya se vio también (capítulos 4 y 9) que la carga de un núcleo es exactamente igual al *número atómico* Z del átomo correspondiente, por el negativo de la carga electrónica, o exactamente Z veces la carga del protón. El número atómico proporciona la posición de un átomo en la tabla periódica de los elementos. La tabla (capítulo 9) muestra que A es aproximadamente igual a $2Z$, excepto para el caso del protón, en que $Z = A = 1$.

2. El análisis de la dispersión de partículas α- por núcleos de A pequeña (capítulo 4) indicó que los radios de esos núcleos son un poco menores de 10F, donde el radio se define como la distancia entre el centro del núcleo y el punto en que el potencial actuando sobre la partícula- α empieza a desviarse de un potencial de Coulomb. Analizando la razón de emisión de partículas α-por núcleos radiactivos de A grande (capítulo 6) se encuentra que el radio de estos núcleos, definido del mismo modo, es $\simeq$9F. El símbolo F representa la unidad de longitud, llamada *fermi*, que se utiliza en física nuclear. Su valor es

$$1\ \text{F} = 1 \times 10^{-15}\ \text{m} \tag{15-1}$$

Obsérvese que esta longitud, característica de los núcleos, es cinco órdenes de magnitud menor que la longitud 1 Å característica de los átomos, ya que $1\ \text{Å} = 1 \times 10^{-10}$ m.

3. Tanto la dispersión como la emisión de partículas, α- al analizarlas, demuestran la existencia de una fuerza *nuclear*, que es *atractiva*, y que actúa entre la partícula y el núcleo además de la fuerza repulsiva de Coulomb que actúa entre ambos. Indican que la fuerza nuclear es de muy *corto alcance*, es decir, que se extiende sobre una distancia apreciablemente menor que 10F. Los análisis también indican que la fuerza nuclear es *fuerte*, comparada con la fuerza de Coulomb, ya que la domina, pues siendo esta última repulsiva se produce una atracción sobre la partícula α cuando ésta se encuentra cercana al núcleo. Experimentos modernos que involucran la dispersión de protones por protones, demuestran que el alcance de la fuerza nuclear es $\simeq 2F$ y la magnitud de la energía negativa asociada con la fuerza atractiva, es mayor que la energía de Coulomb cuando los protones se encuentran separados por esa distancia, en un factor de 10. Además, los experimentos que involucran la dispersión de protones por neutrones, indican que la fuerza nuclear es *independiente de la carga*. Es decir, la fuerza nuclear entre protones y neutrones es igual que entre neutrones y neutrones, o entre protones y protones (exceptuando efectos del principio de exclusión que se aplican solamente en los dos últimos casos). A pesar de que los experimentos de dispersión, que proporcionan una prueba experimental directa de la independencia respecto a la carga de las fuerzas nucleares, son relativamente recientes, en una etapa muy inicial se hizo un pronóstico bastante acertado de

que la fuerza nuclear debería presentar esta propiedad simplificadora. Dichos experimentos de dispersión se considerarán en el capítulo 17 y otras evidencias de la independencia de la carga, se considerarán más adelante en este capítulo y en el capítulo 16. Mientras se llega a ese punto, aquí también se hará la suposición de que la fuerza nuclear es independiente de la carga. Finalmente, debe mencionarse que la fuerza nuclear es extremadamente fuerte comparada con la fuerza gravitacional. La magnitud de la energía asociada con la fuerza nuclear actuando entre dos protones separados por menos de 2F, es mayor que su energía gravitacional por un factor de aproximadamente 10^{40}.

4. Se ha mencionado (capítulos 8 y 10) que los núcleos poseen momentos dipolares magnéticos, que resultan de los momentos dipolares magnéticos intrínsecos de los protones y neutrones del núcleo; y de las corrientes que circulan en los núcleos por el movimiento de los protones. Los momentos dipolares magnéticos nucleares se estudian utilizando equipo de espectroscopía óptica de extremadamente alta precisión, con el fin de medir el *desdoblamiento hiperfino* de los niveles de energía atómicos que resultan de la interacción con el campo magnético producido por los electrones atómicos. El valor de la energía de interacción $\overline{\Delta E}$ depende de la orientación del momento dipolar magnético nuclear en el campo magnético interno, y está dado por la ecuación

$$\overline{\Delta E} = C[f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)] \tag{15-2}$$

donde j, i, y f, son números cuánticos que especifican las magnitudes de, el impulso angular electrónico total, impulso angular nuclear total, e impulso angular total del átomo, respectivamente. Esta ecuación es completamente análoga a (10-15) que describe la energía de interacción spin-órbita del átomo. La constante C es proporcional a la magnitud del *momento dipolar magnético nuclear* μ. Efectuando mediciones de $\overline{\Delta E}$, y consecuentemente de C, se demuestra que para todos los núcleos, μ es del orden de magnitud del magnetón nuclear μ_n. Esta cantidad es

$$\mu_n = \frac{e\hbar}{2M} = 0.505 \times 10^{-26} \text{ A-m}^2 \simeq 10^{-3}\mu_b \tag{15-3}$$

donde M es la masa del protón y μ_b es el magnetón de Bohr. Las medidas del desdoblamiento hiperfino, también demuestran que el signo del momento dipolar magnético nuclear (que proporciona la orientación relativa del vector de momento dipolar magnético y del vector de impulso angular del núcleo) es positivo (paralelo) en algunos casos y negativo (antiparalelo) en otros. Los núcleos, para los cuales A y Z son pares, poseen $\mu_n = 0$.

5. El número cuántico del impulso angular nuclear total i, usualmente denominado *spin nuclear*, se puede obtener contando simplemente el número de niveles de energía de un multiplete de desdoblamiento hiperfino. Si el multiplete está asociado con un valor de j mayor que i, entonces, f puede tomar $2i + 1$ valores diferentes, de modo que habrá $2i + 1$ diferentes niveles de energía. Se encuentra que i es un entero para núcleos con A par, $i = 0$ si además Z *también es par, y si* A es impar, entonces i es semientero. La magnitud I del impulso angular nuclear total se puede dar en términos de i mediante la relación usual $I = \sqrt{i(i+1)}\,\hbar$. El impulso angular total de un núcleo resulta de los impulsos angulares de spin intrínsecos de sus protones y neutrones y también del impulso angular orbital debido al movimiento de estas partículas dentro del núcleo. Debe hacerse énfasis en que en física nuclear la palabra *spin* se refiere frecuentemente al impulso angular *total* del núcleo, en contraste con la física atómica donde la palabra se refiere al impulso angular de spin intrínseco únicamente. Cuando haya posibilidad de una confusión, se seguirá utilizando la terminología impulso angular de spin intrínseco y se continuará utilizando el símbolo s, cuando se refiera a una parte del impulso angular de una sola partícula que no tiene que ver con el impulso angular orbital (por ejemplo, los impulsos angulares de spin intrínsecos de ambos protones y electrones están dados por $s = 1/2$).

6. Muy estrechamente relacionado con el spin de un núcleo se encuentra el *carácter de la simetría* de la eigenfunción para un sistema que contenga dos o más núcleos de la misma especie

(capítulo 9). Esto se estudia analizando los espectros de moléculas diatómicas que contienen dos núcleos idénticos (capítulo 12). Se encuentra que los núcleos con número cuántico de spin, i, entero (núcleos con A par) son del tipo simétrico, es decir, son bosones, mientras que núcleos con i semientero (núcleos con A impar) son del tipo antisimétrico, es decir, son fermiones. Dichos espectros moleculares proporcionan medidas independientes de i que confirman los valores obtenidos del desdoblamiento hiperfino.

7. Como ya se indicó anteriormente, los núcleos se componen de protones y neutrones. El neutrón es una partícula sin carga de aproximadamente la misma masa que el protón y con precisamente el mismo impulso angular de spin intrínseco y carácter de simetría ($s = 1/2$, antisimétrico). Un núcleo con número de masa A y número atómico Z, contiene A *nucleones*, palabra que se utiliza para ambos protones y neutrones, de los cuales Z son protones y $A - Z$ son neutrones. Esta regla conduce, obviamente, a una carga y una masa en concordancia con el punto 1.

Antes del descubrimiento del neutrón se pensaba que un núcleo con un número de masa A y número atómico Z, contenía A protones y $A - Z$ electrones. Esta regla también conduce a una masa y carga en concordancia con el punto 1, sin embargo, ya se ha visto que la energía del punto cero es inconmensurablemente alta si una partícula tan ligera como un electrón se encuentra confinada en una región tan pequeña como un núcleo (capítulo 6). Además, el spin y el carácter de la simetría de los núcleos compuestos por protones y neutrones son, en todos los casos, concordantes con las medidas descritas en los puntos 5 y 6. En núcleos en los que A es par y Z es impar, el spin y el carácter de la simetría no concuerdan con las medidas si los núcleos se componen de protones y electrones.

Ejemplo 15-1 El número de masa y el número atómico del núcleo de la variedad de nitrógeno más abundante son: $A = 14$, $Z = 7$. El spin nuclear medido y el carácter de la simetría son: $i = 1$, simétrico. (ver los ejemplos 12-4 y 12-5). Demostrar que el spin y el carácter de la simetría no concuerdan con la suposición de que los núcleos contienen A protones y $A - Z$ electrones. Demostrar también que el spin y el carácter de la simetría son concordantes con la suposición de que los núcleos contienen A nucleones de los cuales Z son protones y $A - Z$ son neutrones.

Si el núcleo contiene 14 protones y 7 electrones, contiene un número impar, $14 + 7 = 21$, de las partículas que poseen números cuánticos del impulso angular de spin intrínseco, semientero. (Todas tienen $s = 1/2$). Las reglas para combinar los números cuánticos de impulso angular, presentadas en la sección 8-5, hacen evidente que, ya sea que estas partículas posean o no impulsos angulares orbitales, cada uno de los números cuánticos de su impulso angular total serán semienteros, ya que los números cuánticos del impulso angular orbital, son enteros. Además, es evidente que los núcleos que contienen un número impar de partículas, cada una de las cuales tiene un número cuántico del impulso angular total semientero, solamente pueden tener un número cuántico de impulso angular total semientero. En otras palabras, su spin nuclear será semientero, que no concuerda con las mediciones.

También resulta evidente, del estudio de la sección 9-3, que el carácter de la simetría de un núcleo que contiene un número impar de partículas antisimétricas debe ser antisimétrico. La razón está en que un intercambio de marcas de dos de esos núcleos es equivalente a un número impar de intercambios de las marcas de las partículas antisimétricas. Esto implica un factor multiplicativo con la eigenfunción total del sistema que es una potencia impar de menos uno, lo que es igual a menos uno y, por lo tanto, la eigenfunción total es antisimétrica. Una vez más se ve que el núcleo de nitrógeno no puede contener 14 protones y 7 electrones, dando así un número impar de partículas, ya que las mediciones indican que es un núcleo de tipo simétrico.

Si el núcleo contiene 7 protones y 7 neutrones, el número total de partículas es $7 + 7 = 14$, un número par. Como los neutrones tienen el mismo impulso angular de spin intrínseco y el mismo carácter de la simetría que los protones (o electrones), entonces se puede ver, que el núcleo será simétrico, ya que en un intercambio de marcas entre dos núcleos, la eigenfunción estará multiplicada por una potencia par de menos uno, y una potencia par de menos uno es igual a más uno. Su spin nuclear será entero, ya que un número par de partículas con números cuánticos del impulso angular de spin intrínseco semienteros darán lugar a un número cuántico del impulso angular total entero. Estas dos predicciones se encuentran en concordancia con las mediciones. ◀

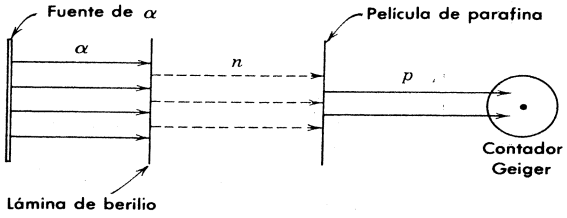


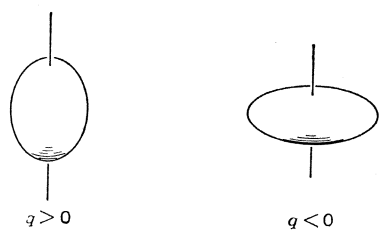
FIGURA 15-2
Descripción esquemática del arreglo experimental utilizado por Chadwick en el descubrimiento del neutrón.

Algunos años antes de su descubrimiento, Rutherford sugirió la existencia de una partícula que tuviese las propiedades de lo que hoy se llama neutrón. Fueron muchos los que trataron de realizar experimentos para detectarla. Esto fue difícil, ya que muchos de los dispositivos utilizados para detectar partículas dependen de la ionización y al no tener carga el neutrón, no puede ionizar átomos fácilmente cuando pasa a través de la materia. En 1932, Chadwick tuvo éxito detectando neutrones emitidos por núcleos de berilio cuando éstos son bombardeados con partículas α obtenidas de una fuente radiactiva. Utilizó un contador Geiger colocado detrás de una capa de parafina. Los neutrones chocan con los protones de la parafina y les transfieren una fracción apreciable de su energía cinética. Enseguida, los protones penetran en el contador Geiger donde son contados con gran eficiencia ya que estando cargados producen mucha ionización. El arreglo experimental se encuentra indicado en la figura 15-2.

8. Muchos núcleos no tienen forma esférica precisamente, sino que tienen la forma de una elipsoide. Las primeras evidencias de lo anterior provinieron de medidas precisas del desdoblamiento hiperfino de los niveles de energía de los átomos que contienen a dichos núcleos. Si el desdoblamiento hiperfino fuera debido totalmente a la energía de orientación del momento dipolar magnético nuclear en el campo magnético interno del átomo, como se supuso en (15-2) la analogía con (10-15) para la interacción spin-órbita requeriría que el patrón formado con los niveles de energía atómicos desdoblados estuvieran sujetos a una *regla del intervalo* como la de Landé (10-16). Pero en el desdoblamiento hiperfino de muchos átomos, se observan desviaciones de una regla del intervalo como esa. Las desviaciones indican que el desdoblamiento hiperfino se debe en parte a una interacción entre una distribución de carga nuclear elipsoidal y el campo eléctrico atómico. Es decir, en estos átomos la energía depende de la orientación de la distribución de carga nuclear elipsoidal en el campo eléctrico interno del átomo, así como de la orientación del momento dipolar magnético nuclear en el campo magnético interno del átomo.

La desviación observada en la distribución de carga nuclear de la simetría esférica, está especificada por el *momento cuadrupolar eléctrico nuclear* q. Como se ilustra en la figura 15-3, para $q>0$ la distribución de carga elipsoidal se encuentra elongada en la dirección de su eje de

FIGURA 15-3
Izquierda: Distribución de carga prolata (en forma de balón de futbol americano) que origina un momento cuadrupolar q positivo. *Derecha:* Distribución de carga oblata (en forma de calabaza) que origina un momento cuadrupolar negativo. Ambos elipsoides son simétricos respecto al eje que pasa por sus centros.



simetría, la elongación crece a medida que q se vuelve más positiva. Para $q < 0$ la distribución de carga elipsoidal se aplana en la dirección de su eje de simetría, aplanándose más a medida que q se vuelve más negativa. En la sección 15-10 se dará una definición más precisa de q.

En núcleos con spin $i \geq 1$, las medidas del desdoblamiento hiperfino demuestran que existen casos para los que el momento cuadrupolar eléctrico $q > 0$, así como también casos para los que $q < 0$. Sin embargo, para núcleos con $i = 0$ o $i = 1/2$, estas medidas siempre dan $q = 0$; es decir, para dichos núcleos no se observa una desviación de la forma esférica en estas medidas. Resulta fácil entender por qué un núcleo aparentará tener una forma esférica, si su spin nuclear es cero. Si no tiene spin nuclear, no tendrá una orientación particular en el espacio ya que no existirá un vector de impulso angular total que deba mantener una componente fija en alguna dirección. Puede pensarse que el núcleo asume, en sucesión muy rápida, todas las orientaciones en el espacio posibles. Así que aunque en la realidad no sea esférico ésto no podría determinarse de medidas de desdoblamiento hiperfino ya que dicho desdoblamiento, como muchos otros efectos observables, dependen de la forma del núcleo promediada en el tiempo. Diciéndolo de otro modo, la mayoría de las medidas simplemente no poseen la resolución temporal requerida para detectar la forma instantánea del núcleo. Sin embargo, las medidas que implican reacciones nucleares si poseen esa resolución, y como se estudiará el próximo capítulo, muchos núcleos con spin nuclear $i = 0$ realmente no son esféricos a pesar de que ésto no puede determinarse por medio del desdoblamiento hiperfino. Argumentos de simetría más complicados, demuestran que si el spin nuclear es $i = 1/2$. deberá observarse que, mediante desdoblamiento hiperfino y otras mediciones que impliquen promedios en el tiempo, los núcleos son esféricos.

Los valores más grandes de q se encuentran en núcleos correspondientes a elementos en la región de las tierras raras. En el caso más extremo, la dimensión más grande de la distribución de carga elipsoidal se encuentra a lo largo del eje de simetría y excede la dimensión más pequeña por aproximadamente 30%. Sin embargo, para núcleos típicos con $i \geq 1$, la diferencia entre las dimensiones mayor y menor del elipsoide es en un porcentaje muy bajo. Por lo tanto, para la mayoría de los propósitos, resulta una buena idea suponer que los núcleos típicos son esféricos, particularmente si más de la mitad de todos los núcleos poseen $i = 0$, por lo tanto, en la mayoría de las circunstancias parecen ser precisamente esféricos.

15.3 Dimensiones y densidades nucleares

Se empezó el análisis detallado de los núcleos considerando los resultados de las medidas de sus dimensiones. Las mediciones más directas y exactas implican la dispersión de electrones, con energías cinéticas de varios cientos de MeV, de blancos muy delgados que contienen átomos cuyos núcleos serán investigados. Como la fuerza nuclear no actúa sobre el electrón, su dispersión se debe a su interacción de Coulomb con la distribución de carga nuclear. Un electrón que se dispersa con un ángulo apreciable, ha tenido un encuentro fuerte con un núcleo, de igual forma como en la dispersión de partículas por núcleos (ver la sección 4-2). Por lo tanto, las mediciones de dispersión electrónica deberían proporcionar información acerca de la distribución de carga nuclear, tal como su tamaño. Desde luego la distribución de carga es sólo la distribución de protones en el núcleo, sin embargo, existe mucha evidencia adicional que indica que los neutrones poseen aproximadamente la misma distribución que los protones.

El método puede concebirse como el uso de un "microscopio electrónico" para "mirar" la distribución de carga. Lo que realmente se ve, no es la distribución de carga misma, sino un patrón de difracción que se produce al dispersar la función de onda electrónica. Cualitativamente se sabe que la separación angular entre mínimos adyacentes del patrón de difracción, θ, estará sujeta a la relación de difracción usual (ver capítulo 3)

$$\theta \simeq \frac{\lambda}{r'} \tag{15-4}$$

donde λ es la longitud de onda de de Broglie y r' es el radio de la distribución de carga. Por lo tanto, una medida de θ nos proporciona inmediatamente una estimación de r' ya que λ se puede obtener al conocer la energía cinética.

Ejemplo 15-2. Un blanco de núcleos dispersa electrones con una energía cinética $K = 500$ MeV, por una distribución de carga de radio r' produciendo un patrón de difracción que posee mínimos con una separación promedio de $\theta \simeq 30°$. Estimar r'.

En primer lugar, se deberá evaluar la longitud de onda de de Broglie λ a partir del impulso del electrón p. Dado que la energía total de los electrones E es muy alta comparada con su energía de masa en reposo $m_0c^2 = 0.51$ MeV, se podrán utilizar las expresiones que son válidas en el límite relativista

$$p = \frac{E}{c} = \frac{K}{c}$$

$$= \frac{500 \text{ MeV}}{3 \times 10^8 \text{ m/seg}} \times \frac{1 \text{ joule}}{6.2 \times 10^{12} \text{ MeV}} = 2.7 \times 10^{-19} \text{ kg-m/seg}$$

Entonces, de la relación de de Broglie se obtiene

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$= \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{2.7 \times 10^{-19} \text{ kg-m/seg}} = 2.4 \times 10^{-15} \text{ m}$$

Convirtiendo θ a radianes y utilizando (15-4), se encuentra

$$r' \simeq \frac{\lambda}{\theta}$$

$$\simeq \frac{2.4 \times 10^{-15} \text{ m}}{0.53 \text{ rad}} = 4.5 \times 10^{-15} \text{ m} = 4.5 \text{ F}$$

como una estimación del radio de la distribución de carga. ◀

Se puede obtener una determinación más precisa de la distribución de carga nuclear, si se analiza, cuantitativamente, el patrón de difracción de los electrones. Lo anterior implica sumar partes de la función de onda dispersadas por cada región del núcleo, en proporción a la densidad de carga supuesta en esa región y tomando en cuenta las diferencias de fase que producen interferencia constructiva o destructiva a diferentes ángulos de dispersión, lo que constituye el patrón de difracción. La distribución de carga supuesta se varía, hasta que se obtiene el mejor ajuste con el patrón de difracción medido. Se encuentra que este ajuste es muy sensible a los detalles de la distribución de carga, de modo que podrá determinarse muy bien aún si el patrón de difracción solo posee un mínimo. El análisis está relacionado con los cálculos de la dispersión de Schrödinger en una dimensión del capítulo 6. Sin embargo, es mucho más complicado, ya que es tridimensional y relativista, de modo que se debe emplear la versión de Dirac de la mecánica cuántica. Por lo tanto, sólo se citarán resultados.

En la figura 15-4 se muestra el aparato experimental utilizado por Hofstadter y colaboradores para medir la dispersión de electrones de alta energía por varios núcleos. Los electrones se producen en un acelerador lineal, parte del cual se muestra en la figura. Opera de modo algo parecido a lo que sería una versión a muy grande escala de los cañones electrónicos que se utilizan en microscopios electrónicos o cinescopios de televisión. Los electrones son dispersados por una película delgada, cuyos átomos contienen los núcleos de interés y que se encuentra localizada en el centro de una cámara de dispersión evacuada. Los electrones dispersados se detectan en el espectrómetro que determina su energía cinética al deflectarlos en un campo magnético. Solo se cuentan los electrones elásticamente dispersados, es decir, aquellos cuya energía cinética es igual a la de los electrones del haz incidente, salvo la pequeña

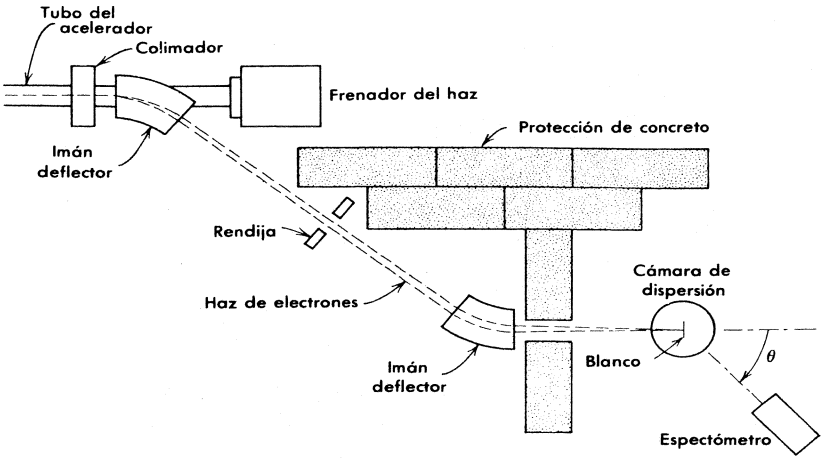


FIGURA 15-4
Uno de los aparatos utilizados para estudiar la dispersión de electrones de alta energía por un blanco con núcleos. Sólo se muestra el extremo final del acelerador lineal de electrones. En realidad, se trata de un tubo evacuado muy largo en el cual los electrones son acelerados por campos de radiofrecuencia hasta la energía requerida.

energía cinética de retroceso de los núcleos. Este requisito asegura que los núcleos se mantienen sin perturbación, de modo que se obtienen las distribuciones de carga correspondientes al estado base.

En la figura 15-5 se muestran los resultados obtenidos de la dispersión de electrones de 420 MeV del núcleo con número de masa pequeño ^{6}C. La ordenada es la sección de dispersión

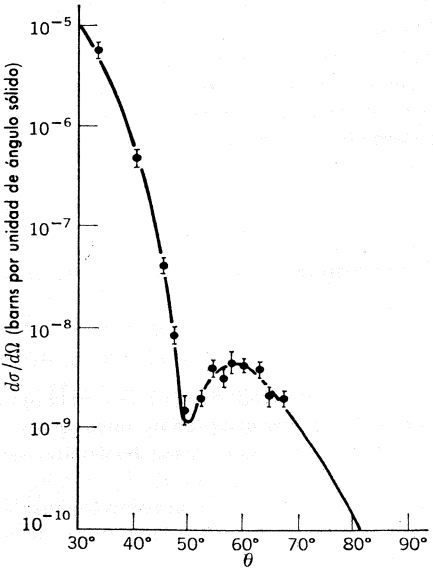


FIGURA 15-5
Medida del número de electrones dispersados por ^{6}C como función del ángulo de dispersión, para electrones incidentes de 420 MeV. La sección diferencial de dispersión $d\sigma/d\Omega$ es la medida utilizada. Se evalúa en términos de la unidad de área comúnmente empleada en la física nuclear, llamada *barn;* 1 bn = 10^{-24} cm^2. La curva resulta del ajuste a los puntos experimentales obtenidos del análisis de la dispersión que se describe en el texto.

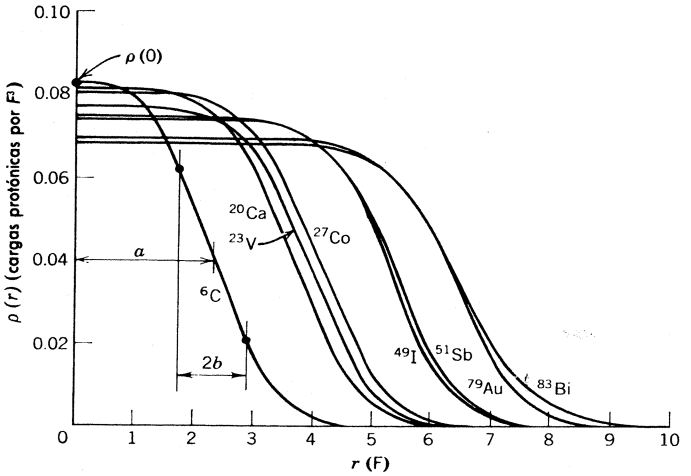


FIGURA 15-6
Densidades de carga para varios núcleos. La densidad de carga denotada por ^{6}C produjo el ajuste a los datos de dispersión de la figura 15-5. El parámetro a del radio de medio valor, el espesor de la superficie $2b$, y la densidad de carga interior $\rho(0)$, son los correspondientes a ^{6}C.

diferencial $d\sigma/d\Omega$, cantidad que se definió en (4-8) y que es proporcional al número de electrones dispersados a cada ángulo. Los puntos con precisión estimada son los datos y la curva llena es el mejor ajuste que se obtuvo del análisis de los datos. La distribución radial de *densidad de carga nuclear* $\rho(r)$, que produce este ajuste, se muestra en la curva señalada con ^{6}C en la figura 15-6.

Para una energía del electrón dada, los patrones de difracción medidos que corresponden a núcleos con números de masa A mayores, presentan mínimos adicionales cuyo espaciamiento se vuelve más pequeño a medida que A aumenta. La ecuación (15-4) indica que lo anterior significa que el radio de la distribución de carga aumenta conforme aumenta A. Los resultados cuantitativos se muestran en las curvas de la figura 15-6 que representan las densidades de carga $\rho(r)$ obtenidas para cierto número de núcleos. Todas estas densidades de carga, se pueden describir con bastante precisión, a través de la ecuación empírica

$$\rho(r) = \frac{\rho(0)}{1 + e^{(r-a)/b}} \tag{15-5}$$

donde los parámetros a y b tienen los valores

$$a = 1.07A^{1/3} \times 10^{-15}\ \text{m} = 1.07A^{1/3}\ \text{F} \tag{15-6}$$

$$b = 0.55 \times 10^{-15}\ \text{m} = 0.55\ \text{F} \tag{15-7}$$

De las ecuaciones (15-5) a la (15-7) y de la figura 15-6 se obtienen las siguientes conclusiones:

1. La densidad de carga de los núcleos, que esencialmente es la distribución de protones en el núcleo, es constante en el interior del núcleo decayendo rápidamente hasta cero en la superficie nuclear.

2. El radio para el cual la densidad tiene la mitad de su valor en el interior a, aumenta lentamente conforme aumenta el número de nucleones en el núcleo, A. Específicamente, el radio a es proporcional a $A^{1/3}$.

3. El espesor de la superficie nuclear está dado aproximadamente por la cantidad $2b$, ya que la mayor parte de la caída de valor del factor $1/[1 + e^{(r-a)/b}]$, de su valor uno en el interior al valor cero en la superficie, ocurre cuando la r cambia de $a - b$ a $a + b$. Este valor del espesor de la superficie $2b$, mantiene aproximadamente el mismo valor para todos los núcleos.

4. El valor en el interior de la densidad de carga, $\rho(0)$, disminuye lentamente conforme aumenta A.

5. Si se supone que la distribución de protones en núcleos es aproximadamente igual que la distribución de neutrones (existen buenas evidencias para esta suposición), entonces, la densidad de carga $\rho(r)$, que proporciona la densidad de protones en el núcleo, es igual a la *densidad de masa* $\rho_M(r)$, que proporciona la densidad de todos los nucleones en el núcleo, excepto por un factor proporcional a Z/A, cociente del número de protones entre el número total de nucleones en el núcleo. Es decir,

$$\rho(r) \propto \frac{Z}{A}\rho_M(r) \tag{15-8}$$

Por lo tanto, la disminución de $\rho(0)$ conforme aumenta A se puede explicar totalmente por la disminución de Z/A al aumentar A. (La tabla periódica muestra que $Z/A \simeq 1/2$, cuando $A \simeq 40$, mientras que $Z/A \simeq 1/2.5$ para $A \simeq 240$). Esto indica que el *valor interior de la densidad de masa* $\rho_M(0)$, *es aproximadamente igual para todos los núcleos.*

Ejemplo 15-3. Evaluar aproximadamente la densidad de masa interior de un núcleo.

Se pueden obtener resultados aproximados muy fácilmente, observando que el cociente entre la densidad de un núcleo y la densidad de un sólido, que contiene átomos con ese núcleo, es

$$\frac{\text{densidad del núcleo}}{\text{densidad de la materia sólida}} \propto \left[\frac{\text{volumen del núcleo}}{\text{volumen del átomo}}\right]^{-1} \propto \left[\left(\frac{\text{radio del núcleo}}{\text{radio del átomo}}\right)^3\right]^{-1}$$

Para todos los núcleos

$$\frac{\text{densidad del núcleo}}{\text{radio del átomo}} \sim 10^{-5}$$

Por ejemplo, el radio de la capa más externa de un átomo de carbón ${}^6C$ es un poco menor que $2\ \text{Å} = 2 \times 10^{-10}$ m, mientras que el radio de la mitad del valor de su carga nuclear o distribución de masa es un poco mayor que $2\ \text{F} = 2 \times 10^{-15}$ m. Por lo tanto, se obtiene

$$\frac{\text{densidad del núcleo}}{\text{densidad de materia sólida}} \sim 10^{15}$$

Como la densidad de la materia sólida es del orden de $10^3\ \text{kg/m}^3$, se encuentra que la densidad de un núcleo tiene el *extremadamente* grande valor

$$\text{densidad del núcleo} \sim 10^{18}\ \text{kg/m}^3$$

Las densidades nucleares son aproximadamente 15 órdenes de magnitud mayores que las densidades que se encuentran en el mundo macroscópico. Por lo tanto, no es sorprendente que otras propiedades nucleares puedan diferir considerablemente de las propiedades de objetos macroscópicos. ◀

15.4 Masas nucleares y sus abundancias

Mediciones muy precisas de las masas nucleares proporcionan información acerca de algunas de las propiedades más básicas de los núcleos. Ahora, conociendo el número de Avogadro y utilizando técnicas químicas, se puede determinar la masa de átomos de una Z particular pero posiblemente con una mezcla de A, con varias cifras significativas. Como la masa de un núcleo difiere de la masa del átomo correspondiente por una cantidad conocida, estas técnicas proporcionan determinaciones muy precisas de las masas nucleares. Sin embargo, las determi-

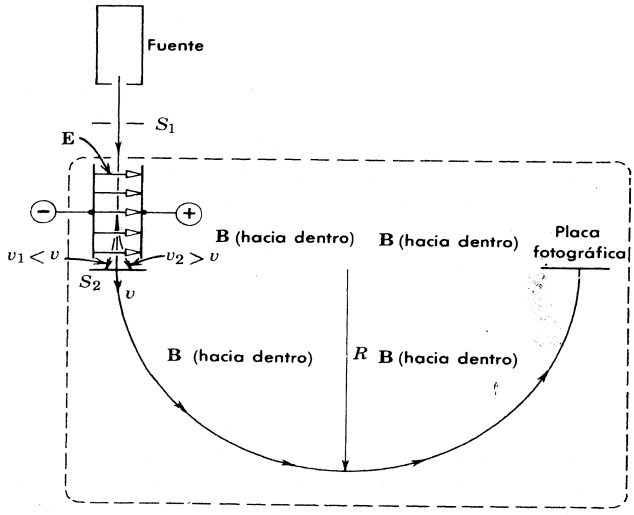


FIGURA 15-7
Aparato utilizado para medir masas atómicas. Los polos magnéticos colocados por arriba y por abajo del plano del papel, proporcionan un campo magnético uniforme con dirección hacia el papel, en toda la región comprendida por la línea discontinua. El aparato que se muestra, está contenido en una cámara de vacío en su totalidad.

naciones extremadamente precisas requeridas en el estudio de los núcleos, requieren de técnicas físicas como *espectrometría de masas* o *balance de energía en reacciones nucleares*. Ambas proporcionan información acerca de *masas atómicas* con Z y A particulares. A partir de estas masas se pueden evaluar las masas de los *núcleos* correspondientes restando Z veces la masa del electrón. Las masas equivalentes a las energías de enlace electrónicas son suficientemente pequeñas para poder ingnorarlas.

Un ejemplo de los muchos tipos de espectrómetros de masa es el diseño Bainbridge, que se ilustra en la figura 15-7. La fuente produce átomos ionizados con carga $+Ze$, masa M y una distribución de velocidades. Estos átomos viajan por una región evacuada con campos eléctricos y magnéticos cruzados que actúan como un filtro de velocidades, y pasan sólo aquéllos con velocidad v que satisfacen la ecuación

$$ZeE = BZev$$

Los términos a la izquierda y a la derecha, son las magnitudes de las fuerzas opuestas eléctrica y magnética. Los átomos de velocidad $v = E/B$ que entran a la región de campo magnético uniforme se flexionan en un semicírculo de radio R, cayendo sobre una placa fotográfica donde reproducen una imagen. La distancia entre el diafragma S_2 y la imagen es $2R$, donde R satisface la ecuación

$$BZev = \frac{Mv^2}{R}$$

El término a la derecha es la masa por la aceleración centrípeta. Resolviendo para M, se obtiene

$$M = \frac{RBZe}{v} = \frac{RB^2Ze}{E} \qquad (15\text{-}9)$$

La masa atómica se puede determinar de medidas absolutas de las cantidades que aparecen en el segundo miembro de (15-9). Sin embargo, en la práctica se utilizan varias moléculas de hidrocarburos para calibrar el aparato sobre un amplio intervalo de masas, en términos de la masa del carbono, como estándar. La razón principal por la que el carbono se utiliza como estándar, o unidad de masa, es que hay una gran variedad de hidrocarburos diferentes y accesibles. De hecho, la fuente de iones por lo general produce algunos hidrocarburos ionizados automáticamente, ya que en el aparato se encuentran hidrocarburos presentes en forma de aceite de bomba de vacío.

Con la técnica de espectrometría de masas se pueden realizar medidas extremadamente precisas. Como ejemplo, considérese el núcleo $^{20}Ca^{40}$. (El subíndice antes del símbolo químico proporciona el valor de Z; el subíndice después del símbolo proporciona el valor de A). La masa del átomo con este núcleo se encuentra citada como

$$M_{_{20}Ca^{40}} = 39.962589 \pm 0.000004u$$

El símbolo u representa una *unidad de masa;* se define en términos de la especie predominante de carbono, de modo que,

$$M_{_6C^{12}} \equiv 12.0000000u \tag{15-10}$$

En la tabla 15-1 se encuentran muchos otros ejemplos de masas atómicas.

En 1911, utilizando el primer espectrómetro de masas, Thomson descubrió la existencia de isótopos. Cuando la fuente contenía una mezcla de gases nobles, encontraba una imagen en la placa fotográfica correspondiente a $A = 20$ y una imagen asociada más débil correspondiente a $A = 22$. Cierto número de pruebas corroboraron que ambas imágenes eran debidas a un gas noble y éste solo podía ser Ne, que tiene un peso atómico químico de 20.18. Estos resultados los interpretó en el sentido de que había dos especies químicamente indistinguibles de átomos de Ne, llamados *isótopos*, uno con $A = 20$ y abundancia relativa de aproximadamente 91% y otro con $A = 22$ y abundancia relativa de 9%. Químicamente son indistinguibles puesto que tienen exactamente la misma estructura de electrones atómicos y puesto que sus núcleos tienen la misma carga y, por lo tanto, la misma Z, sin embargo, físicamente son distinguibles ya que tienen diferente masa, puesto que sus núcleos tienen diferente A. Los núcleos de los isótopos de Ne son: $^{10}Ne^{20}$, $^{10}Ne^{21}$, $^{10}Ne^{22}$; el segundo aparece con una abundancia relativa de 0.3%, y no

TABLA 15-1. Masas atómicas y energías de enlace.

	Z	A	Masa en u	Energía de enlace en MeV	
				Total (ΔE)	Por nucleón ($\Delta E/A$)
$^0n^1$	0	1	1.0086654 (±4)	—	—
$^1H^1$	1	1	1.0078252 (±1)	—	—
$^1H^2$	1	2	2.0141022 (±1)	2.22	1.11
$^1H^3$	1	3	3.0160500 (±10)	8.47	2.83
$^2He^3$	2	3	3.0160299 (±2)	7.72	2.57
$^2He^4$	2	4	4.0026033 (±4)	28.3	7.07
$^4Be^9$	4	9	9.0121858 (±9)	58.0	6.45
$^6C^{12}$	6	12	12.0000000 (±0)	92.2	7.68
$^8O^{16}$	8	16	15.994915 (±1)	127.5	7.97
$^{29}Cu^{63}$	29	63	62.929594 (±6)	552	8.75
$^{50}Sn^{120}$	50	120	119.9021 (±1)	1020	8.50
$^{74}W^{184}$	74	184	183.9510 (±4)	1476	8.02
$^{92}U^{238}$	92	238	238.05076 (±8)	1803	7.58

pudo ser detectado por el aparato de Tomson. Los tres núcleos contienen 10 protones; sin embargo, el primero contiene 10 neutrones, el segundo 11 neutrones y el tercero contiene 12 neutrones.

Los espectrómetros de masa modernos, que utilizan detectores muy sensibles que tienen una respuesta lineal, proporcionan determinaciones muy precisas de la abundancia relativa de los diversos isótopos. Como ejemplo, las abundancias de los isótopos de ^8O que normalmente ocurren en forma de mezcla, son

$$^8O^{16} = 99.759\%$$
$$^8O^{17} = 0.037\%$$
$$^8O^{18} = 0.204\%$$

Otra técnica para la determinación precisa de la masa, que proporciona una verificación suplementaria a la técnica de espectrometría de masas, es el estudio del balance de energía en reacciones nucleares. Considérese la reacción nuclear

$$^2He^4 + {}^7N^{14} \rightarrow {}^8O^{17} + {}^1H^1 \qquad (15\text{-}11)$$

Una *partícula proyectil* $^2He^4$ (una partícula α) interactúa con un *núcleo blanco* $^7N^{14}$ para producir un *núcleo residual* $^8O^{17}$ y una *partícula producto* $^1H^1$ (un protón). Esta fué la primera reacción nuclear artificialmente producida, descubierta por Rutherford en 1919, utilizando partículas α de 7.7 MeV de una fuente radiactiva. Hoy día, se utilizarían partículas α de una variedad de energías, obtenidas tal vez de un generador electrostático, para investigar esta reacción típica. Como se analiza en el apéndice *A*, la masa y la energía cinética no se conservan separadamente en las reacciones nucleares. En su lugar, se conserva la energía relativista total, $E = K + mc^2$ donde K es la energía cinética y m se utiliza aquí como masa en *reposo*. Para el caso general que se ilustra en la figura 15-8, una partícula proyectil a interactúa con un núcleo blanco A, para producir el núcleo residual B y la partícula producto b; es decir,

$$a + A \rightarrow B + b \qquad (15\text{-}12)$$

En este caso, la conservación de la energía relativista total, en el sistema de referencia del laboratorio, será

$$(K_a + m_a c^2) + m_A c^2 = (K_B + m_B c^2) + (K_b + m_b c^2) \qquad (15\text{-}13)$$

Obsérvese que $K_A = 0$ puesto que A está estacionario en el sistema del laboratorio. Como puede haber un intercambio entre energía cinética y energía de masa en reposo, es posible que la energía cinética final $K_B + K_b$ sea mayor, o menor que la energía cinética inicial K_a. A la diferencia se le llama, *valor Q de la reacción*. Es decir,

$$Q = K_B + K_b - K_a \qquad (15\text{-}14)$$

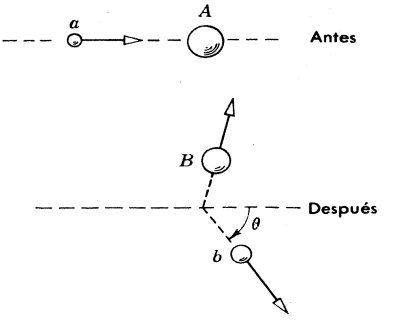


FIGURA 15-8
Reacción nuclear en la que una partícula a incide sobre un núcleo-blanco A. Después de que se lleva a cabo la reacción la partícula producto b es emitida a un ángulo θ, y el núcleo residual B recula de modo tal, que el impulso se conserva.

De (15-13) ésto también se puede escribir como

$$Q = (m_a + m_A - m_B - m_b)c^2 \tag{15-15}$$

Puede verse que una medida del valor Q de la reacción proporciona información respecto a las masas en reposo de las entidades implicadas en la reacción. El valor Q puede medirse, si se determinan K_a, K_b, y K_B. Sin embargo, esta última cantidad es difícil de determinar. Esta dificultad se puede evitar si se utiliza la relación que proviene de la conservación del impulso para eliminar K_B de (15-14). Esto es fácil de hacer en el límite

$$K_a/m_ac^2 \ll 1 \qquad K_b/m_bc^2 \ll 1 \qquad K_B/m_Bc^2 \ll 1$$

donde pueden utilizarse expresiones clásicas como $K_a = m_a v_a^2/2$ y $p_a = m_a v_a$ El resultado es que en este límite clásico,

$$Q = K_b\left(1 + \frac{m_b}{m_B}\right) - K_a\left(1 - \frac{m_a}{m_B}\right) - \frac{2}{m_B}(K_aK_bm_am_b)^{1/2}\cos\theta \tag{15-16}$$

donde θ es el ángulo de emisión de la partícula producto, definida en la figura 15-8. Este resultado es de suficiente precisión para el análisis de reacciones nucleares a las energías que se han utilizado en la mayoría de los experimentos.

En (15-15), las masas se refieren a las masas en reposo de los núcleos A y B y a las masas en reposo de las partículas nucleares a y b completamente ionizadas. Sin embargo, hasta la precisión de la aproximación en la que el equivalente en masa de la energía de enlace del electrón, se ignora, esta ecuación puede también ser considerada como

$$Q = (M_a + M_A - M_B - M_b)c^2 \tag{15-17}$$

donde la M mayúscula se refiere a las masas de átomos neutrales. La segunda forma se obtiene de la primera, agregando $(Z_a + Z_A)mc^2$ a los primeros dos términos y restando $(Z_B + Z_b)mc^2$ de los últimos dos, donde mc^2 es la energía de la masa en reposo del electrón. Este procedimiento es válido, puesto que la relación

$$Z_a + Z_A = Z_B + Z_b \tag{15-18}$$

debe ser válida en cualquier reacción nuclear con el fin de que la carga se conserve.

Ejemplo 15-4. En la reacción de Rutherford, (15-11), las partículas proyectiles $^2He^4$ (partículas α) de energía cinética $K_a = 7.70$ MeV, interactúan con un núcleo blanco de $^7N^{14}$ para producir núcleos residuales de $^8O^{17}$ y partículas producto $^1H^1$ (protones). Se encuentra que los protones emitidos a 90º respecto del haz de partículas α incidentes, poseen una energía cinética $K_b = 4.44$ MeV. (a) Determinar el valor de la Q de la reacción. (b) Después, utilizar ese valor para determinar la masa atómica del $^8O^{17}$ en términos de las otras tres masas atómicas implicadas en la reacción.

(a) Como el ángulo de emisión es $\theta = 90°$, (15-16) se simplifica y Q queda dado por

$$Q = K_b\left(1 + \frac{m_b}{m_B}\right) - K_a\left(1 - \frac{m_a}{m_B}\right)$$

El cociente entre las masas de la partícula producto y núcleo residual, m_b/m_B, se puede tomar con suficiente exactitud, como 1/17; asimismo, el cociente de la masa de la partícula proyectil y la masa del núcleo residual, m_a/m_B, se puede tomar como 4/17. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} Q &= K_b(1 + 1/17) - K_a(1 - 4/17) \\ &= 1.06K_b - 0.765K_a \\ &= 1.06 \times 4.44 \text{ MeV} - 0.765 \times 7.70 \text{ MeV} = -1.18 \text{ MeV} \end{aligned}$$

(b) Las masas atómicas involucradas en la reacción, están relacionadas al valor Q dividido por c^2, tal que

$$\frac{Q}{c^2} = -\frac{1.18 \text{ MeV}}{c^2}$$

Para expresar lo anterior en términos de unidades de masa, se utiliza la relación

$$uc^2 = 931.5 \text{ MeV}$$

que viene de evaluar la energía de la masa en reposo de una partícula cuya masa en reposo es $1u$. Se obtiene

$$\frac{Q}{c^2} = -\frac{1.18 \text{ MeV}}{c^2} \times \frac{uc^2}{931.5 \text{ MeV}} = -0.00127u$$

De acuerdo con (15-17), la masa atómica del $^8O^{17}$ se puede expresar en términos de las otras masas atómicas, y Q/c^2, en la forma siguiente

$$M_{^8O^{17}} = M_{^2He^4} + M_{^7N^{14}} - M_{^1H^1} - \frac{Q}{c^2} = M_{^2He^4} + M_{^7N^{14}} - M_{^1H^1} + 0.00127u$$

Por lo tanto, la masa atómica del $^8O^{17}$ puede ser determinada del valor medio de Q, si las otras masas atómicas son conocidas con precisión. ◀

El análisis del balance de energía en un gran número de reacciones, proporcionan resultados que concuerdan, precisamente, con los resultados obtenidos por espectrometría de masas. Además, *la concordancia entre estos dos métodos proporciona la confirmación más exacta de la teoría relativista de la masa y la energía*, en la cual se basa el balance de energías. En la tabla 15-1 aparecen algunas de las muchas masas atómicas que se han medido por estos métodos, así como la masa del neutrón. Enseguida se empezará a extraer información acerca de los núcleos de las medidas precisas de sus masas.

Ejemplo 15-5. Utilizar los datos de la tabla 15-1 para comparar la masa del átomo $^2He^4$ con la masa de sus partes constituyentes.

La masa del átomo $^2He^4$ es,

$$M_{^2He^4} = 4.0026033u$$

La masa de sus partes constituyentes es la masa de dos átomos $^1H^1$ más la masa de dos neutrones; es decir

$$2M_{^1H^1} + 2M_{_0n^1} = 2 \times 1.0078252u + 2 \times 1.0086654u$$

$$= 4.0329812u$$

Tanto $M_{^2He^4}$ como $2M_{^1H^1} + 2M_{_0n^1}$ contienen dos masas electrónicas en reposo. Sin embargo, la primera es *menor* que la segunda por la cantidad

$$\Delta M = 4.0329812u - 4.0026033u = 0.0303779u$$

Como se verá inmediatamente, este resultado es una manifestación de la energía de enlace del núcleo de $^2He^4$ ◀

Para cualquier átomo, cálculos como los del ejemplo 15-5 demuestran que su masa es *menor* que la masa de sus partes constituyentes por una cantidad ΔM denominada *deficiencia de masa*. Esto tiene su origen en el núcleo y en la equivalencia entre la masa y la energía. Por ejemplo, considérese uno cualquiera de los cuatro nucleones del núcleo de $^2He^4$ Como el nucleón se encuentra ligado establemente al núcleo, deberá moverse en algo así como un potencial atractivo que represente la atracción neta de los otros tres nucleones. Además para estar ligado debe tener una energía negativa $E < 0$. En la figura 15-9 se muestra esta situación. La energía requerida para extraer un nucleón del núcleo, dejándolo como un nucleón libre con energía cinética despreciable en $r \to \infty$, es $|E|$. Por el contrario, si un nucleón libre viene de $r \to \infty$ y se combina con los otros nucleones para formar el núcleo, su energía debe disminuir

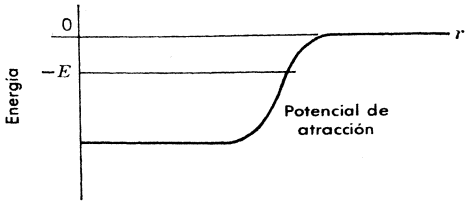


FIGURA 15-9
Representación esquemática de las energías potencial y total, para un nucleón de helio. El potencial se extiende más allá de la distribución de masa nuclear, en aproximadamente el alcance de la fuerza nuclear y después se va a cero rápidamente.

por la cantidad $|E|$. La energía en exceso se puede extraer por la emisión de radiación electromagnética. La misma situación es válida para los otros nucleones del núcleo. De esta manera, se puede ver que cuando un sistema disperso de nucleones libres se combina para formar un núcleo, la energía total del sistema debe disminuir en la cantidad ΔE, *la energía de enlace del núcleo*. La disminución ΔE en la energía total del sistema debe estar, de acuerdo con la teoría de la relatividad, acompañada por una disminución ΔM en su masa, donde

$$\Delta Mc^2 = \Delta E \tag{15-19}$$

Para $^2He^4$, la deficiencia de masa es $\Delta M = 0.0303779u$. Por lo tanto, su energía de amarre es $\Delta E = \Delta Mc^2 = 28.3$MeV, donde convenientemente se ha tomado del ejemplo 15-4, la relación

$$1u \times c^2 = 931.5 \text{ MeV} \tag{15-20}$$

Este valor de ΔE se encuentra enlistado en la penúltima columna de la tabla 15-1. La última columna de la tabla enlista $\Delta E/A$, denominada *energía de amarre promedio por nucleón*, que es la energía de amarre del núcleo dividida por el número de nucleones que contiene. Para $^2He^4$, el valor de $\Delta E/A$ es 28.3 MeV/4 = 7.07 MeV.

Una de las características más importantes de un núcleo es la energía de amarre promedio por nucleón. En la figura 15-10, se encuentra graficada esta cantidad como función de A. Los

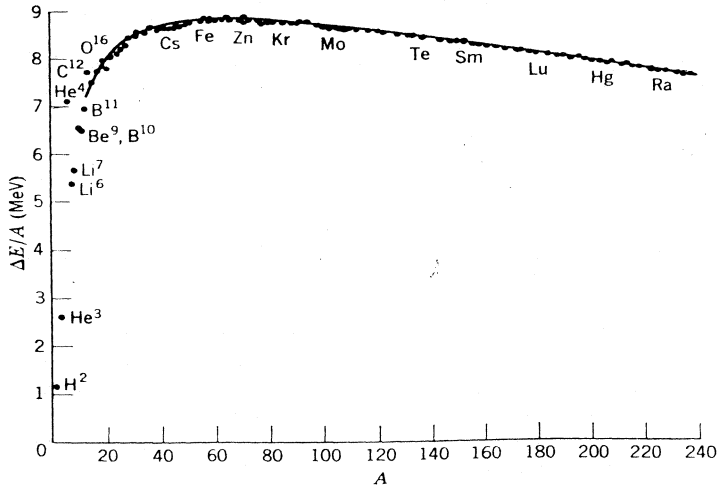


FIGURA 15-10
Energía de enlace promedio por nucleón para núcleos estables. La curva suave se obtiene a partir de la fórmula semiempírica de la masa desarrollada en la sección 15-5.

puntos, son los datos obtenidos de las masas medidas en la forma antes descrita. Obsérvese que $\Delta E/A$ crece rápidamente conforme aumenta A, al principio, pero muy pronto $\Delta E/A$ se mantiene aproximadamente constante en un valor de

$$\Delta E/A \simeq 8 \text{ MeV} \tag{15-21}$$

Si cada nucleón en el núcleo ejerciera la misma atracción sobre todos los demás nucleones, la energía de enlace por nucleón continuaría creciendo a medida que más y más nucleones se van agregando al núcleo; es decir, $\Delta E/A$ sería proporcional a A. El hecho extremadamente importante de que $\Delta E/A$ no es proporcional a A, se debe, en parte, al corto alcance de las fuerzas nucleares. En el capítulo 17 se presentará una explicación completa de la *saturación de las fuerzas nucleares*, causante del hecho de que $\Delta E/A$ tiene aproximadamente el mismo valor en casi toda la tabla periódica. Esta saturación tiene cierta analogía con la saturación de fuerzas moleculares en el enlace covalente, sin embargo, como se verá en este capítulo, el origen de los dos fenómenos de saturación no tiene relación alguna entre sí.

Examinando la figura 15-10 se demuestra que $\Delta E/A$ tiene un máximo en aproximadamente 8.7 MeV para $A \simeq 60$, disminuyendo después lentamente hasta aproximadamente 7.6 MeV para $A \simeq 240$. Se encontrará que la disminución se debe a las repulsiones de Coulomb entre los protones del núcleo. Una de las consecuencias es el fenómeno de la *fisión nuclear*, en el que un núcleo con A grande, como $^{92}U^{238}$, se divide en dos núcleos con A intermedia, porque los núcleos con A intermedia son más estables que un núcleo con A grande.

Ejemplo 15-6. Utilizar la figura 15-10, para estimar la diferencia entre la energía de enlace de un núcleo de $^{92}U^{238}$ y la suma de las energías de enlace de dos núcleos que se producirían si se fisionara simétricamente.

La figura muestra que la energía de enlace promedio por nucleón para un núcleo cuyo número de masa se encuentra en torno a $A = 238$ es ~ 7.6 MeV. Por lo tanto, la energía de enlace para un núcleo presente antes de la fisión es $\simeq 238 \times 7.6$ MeV $\simeq 1810$ MeV. La figura muestra también, que la energía de enlace promedio por nucleón, cuyo número de masa se encuentra en torno a $A = 238/2 = 119$ es $\simeq 8.5$ MeV. Por lo tanto, cada uno de los núcleos presentes después de la fisión tendrá una energía de enlace de $\sim 119 \times 8.5$ MeV ~ 1010 MeV. La suma de sus energías de enlace es $\simeq 2020$ MeV. Esta suma es mayor que la energía de enlace inicial de 1810 MeV, aproximadamente por 210 MeV. Por lo tanto, el estado final (después de que el núcleo se fisiona) es más estable que el estado inicial (antes de que el núcleo se fisione) dado que la energía de enlace total es mayor en el estado final. Cuando la energía de enlace total aumenta por 210 MeV en la fisión, se libera esta misma cantidad de energía. La mayor parte de ella se convierte en energía cinética de los dos núcleos producidos en la fisión. En un reactor nuclear, esta energía cinética se degrada a energía térmica, lo que constituye la fuente de potencia del reactor.

◀

En la *fusión nuclear*, dos o más núcleos con A muy pequeña, se combinan para formar un núcleo más grande que tendrá un energía de enlace promedio por nucleón mayor, ya que su valor de A estará más cerca del valor $A \simeq 60$ para el cual $\Delta E/A$ tiene un máximo. Parecería que sólo algunos núcleos cercanos a $A = 60$ serían estables. Esto no es cierto debido a otros factores, que se estudiarán más adelante, los que inhiben la fisión y la fusión.

Esta sección se concluye, considerando la distribución de los valores de Z y A de los núcleos estables, lo que constituye una información adicional que se obtiene de las medidas de espectrometría de masas. En la figura 15-11, se encuentran graficados los datos. Cada núcleo estable se encuentra indicado con un cuadro cuya abscisa es el *número neutrónico*, $N = A - Z$ el número de neutrones en el núcleo, y cuya ordenada es el número atómico Z, el número de protones en el núcleo. Obsérvese que para Z pequeña existe una tendencia de que $Z = N$ en los núcleos estables. Se verá que esto se debe al hecho de que las fuerzas nucleares operan simétricamente en protones y neutrones, puesto que las fuerzas nucleares son independientes de la carga, como se mencionó en la sección 15-2. Para Z grande, los núcleos estables tienden a tener $Z < N$. Este es otro efecto de las repulsiones de Coulomb entre protones, que producen una energía positiva proporcional a Z^2. El efecto discrimina energéticamente en contra de la

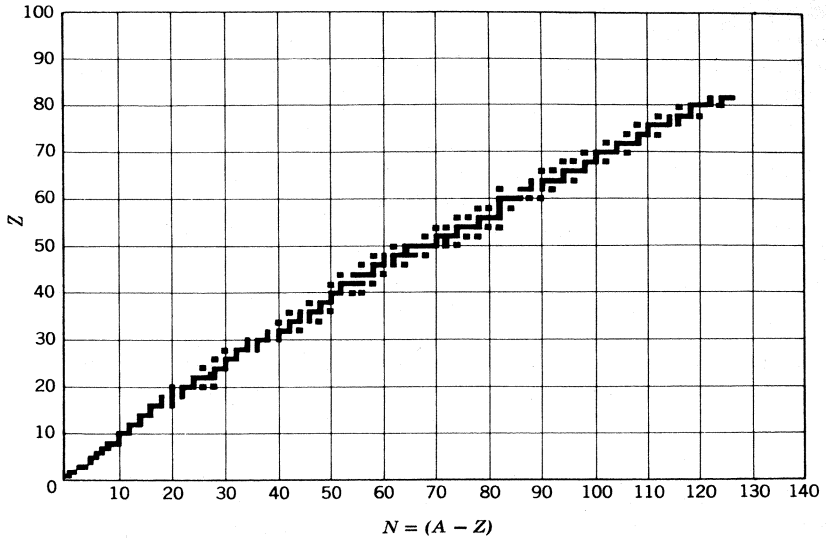


FIGURA 15-11
Distribución de núcleos estables.

presencia de protones en núcleos de Z grande, pero no es importante en núcleos de Z pequeña donde la tendencia $Z = N$ domina.

Existe una tendencia de los núcleos estables de tener Z par y también N par. Esto puede verse de los datos de la tabla 15-2, en donde se enlista el número de núcleos estables de los diversos tipos. Se encontrará que esta tendencia está presente porque dos nucleones de la *misma* especie pueden formar un par muy próximos entre sí, en donde interactúan de modo particularmente fuerte y por ese motivo realizan una contribución particularmente grande a la energía de enlace nuclear.

TABLA 15-2. Distribución de los núcleos estables.

A	N	Z	Número de núcleos estables
	Par	Par	166
Impar			
	Par	Impar	8
	Par	Impar	57
Impar			
	Impar	Par	53

15.5 El modelo de la gota

Enseguida, se empleará el modelo nuclear de la gota y la información obtenida a partir de los datos relacionados con la distribución de los valores de Z y A para núcleos estables,con el fin de obtener una fórmula para las masas de estos núcleos. El modelo de la gota se basa en dos propiedades que se ha encontrado son comunes a todos los núcleos, excepto aquellos de A pequeña; (1) sus densidades de masa interior son aproximadamente iguales y (2) sus energías de enlace total son aproximadamente proporcionales a sus masas ya que $\Delta E/A \simeq$ constante. Ambas propiedades se pueden comparar con otras análogas relacionadas con gotas macroscópicas de algún líquido incompresible. Para esas gotas clásicas de diversos tamaños (1) sus densidades en interiores son iguales y (2) sus calores de vaporización son proporcionales a sus masas. La segunda comparación es significativa, ya que el calor de vaporización es la energía necesaria para dispersar la gota en sus moléculas constituyentes y, por lo tanto, es comparable con la energía de enlace del núcleo. La fórmula para la masa será desarrollada utilizando el modelo para sugerir otras analogías entre el núcleo y una gota clásica, sin embargo, será necesario incluir términos en la fórmula que describan ciertas propiedades nucleares cuyos orígenes no son clásicos.

El modelo de la gota aproxima el núcleo a una esfera con una densidad interior uniforme, que cae a cero bruscamente en su superficie. El radio es proporcional a $A^{1/3}$; el área de la superficie es proporcional a $A^{2/3}$; y el volumen es proporcional a A. Como la masa es también proporcional a A, que es el número de nucleones en el núcleo, se obtiene el resultado de que la densidad = masa/volumen $\propto A/A =$ constante, en concordancia con las medidas de dispersión de electrones.

La fórmula para la masa consiste de una suma de seis términos

$$M_{Z,A} = f_0(Z,A) + f_1(Z,A) + f_2(Z,A) + f_3(Z,A) + f_4(Z,A) + f_5(Z,A) \quad (15\text{-}22)$$

donde $M_{Z,A}$ representa la masa de un átomo cuyo núcleo esta especificado por Z y A. El primer término es la *masa de las partes constituyentes* del átomo

$$f_0(Z,A) = 1.007825Z + 1.008665(A - Z) \quad (15\text{-}23)$$

El coeficiente de Z es la masa del átomo $^1H^1$ en unidades de masa y el coeficiente de $(A - Z)$ es la masa del neutrón, $^0n^1$, en las mismas unidades los siguientes términos corrigen para los equivalentes de masa de varios efectos que contribuyen a la energía de enlace total del núcleo.

De suma importancia, es el término del *volumen*

$$f_1(Z,A) = -a_1A \quad (15\text{-}24)$$

Esto corresponde a una energía de enlace proporcional a la masa o volumen nuclear. El término describe la tendencia de que la energía de enlace por nucleón sea constante. Un término como ese, estaría presente en el caso de una gota clásica. Debido a que es negativo reduce la masa y, por lo tanto, aumenta la energía de enlace.

Enseguida, se encuentra el término de la *superficie*

$$f_2(Z,A) = +a_2A^{2/3} \quad (15\text{-}25)$$

Esta es una corrección proporcional al área de la superficie del núcleo. Como el término es positivo, aumenta la masa y consecuentemente reduce la energía de enlace. En una gota clásica, este término representaría el efecto de la tensión superficial. Aparecería por el hecho de que una molécula en la superficie de la gota sólo experimenta fuerzas atractivas de un solo lado, de modo que su energía de enlace es menor que la energía de enlace de una molécula en el interior que experimenta fuerzas atractivas por todos lados. Por lo tanto, si la energía de enlace total se hace simplemente proporcional al volumen de la gota se estará sobreestimando la energía de

enlace de las moléculas de la superficie y entonces deberá hacerse una corrección proporcional al número de esas moléculas, o al área de la superficie, con el fin de reducir la energía de enlace. En un núcleo sucede lo mismo.

El término de Coulomb que es

$$f_3(Z,A) = +a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \tag{15-26}$$

Toma en cuenta la energía de Coulomb positiva del núcleo cargado que se supone tiene una distribución de carga uniforme cuyo radio es proporcional $A^{1/3}$. El efecto de las repulsiones de Coulomb entre los protones aumenta la masa y reduce la energía de enlace. Un término similar estaría presente para una gota cargada de un líquido clásico.

El siguiente término introduce una propiedad específica a los núcleos. Es el término de *asimetría*

$$f_4(Z,A) = +a_4 \frac{(Z - A/2)^2}{A} \tag{15-27}$$

que toma en cuenta la tendencia observada de tener $Z = N$. Obsérvese que es cero para $Z = N = (A - Z)$, o $2Z = A$, pero de otro modo es positivo y aumenta conforme aumenta la desviación de esta condición. Es decir, entre mayor sea la desviación de $Z = N$, mayor será la masa y menor la energía de enlace. La forma utilizada en 15-27 es la más simple que tiene estas propiedades, pero existe también alguna justificación teórica, que involucra la independencia de la carga de las fuerzas nucleares, como se indicará más adelante.

La tendencia de los núcleos de tener Z par y N par es tomada en cuenta por el término de *apareamiento*

$$f_5(Z,A) = \begin{cases} -f(A) & \text{si } Z \text{ par, } A - Z = N \textit{ par} \\ 0 & \textit{si } Z \text{ par, } A - Z = N \text{ impar} \\ & \text{o } Z \text{ impar, } A - Z = N \text{ par} \\ +f(A) & \text{si } Z \text{ impar, } A - Z = N \text{ impar} \end{cases} \tag{15-28}$$

Si ambas Z y N son pares, la masa disminuye, y si ambas Z y N son impares, aumenta. Por lo tanto, la energía de enlace se maximiza si ambas Z y N son pares. Una explicación cualitativa sobre el origen de este término será dada más adelante; implica propiedades cuánticas relacionadas con la indistinguibilidad de partículas idénticas. Sin embargo, la forma exacta de la función $f(A)$ por lo general se determina ajustando los datos. En el caso de una ley potencial simple, el mejor ajuste se obtiene con

$$f(A) = a_5 A^{-1/2} \tag{15-29}$$

Juntando de (15-22) a (15-29) se tiene

$$M_{Z,A} = 1.007825Z + 1.008665(A - Z) - a_1 A + a_2 A^{2/3} + a_3 Z^2 A^{-1/3} + a_4 (Z - A/2)^2 A^{-1} + \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ +1 \end{pmatrix} a_5 A^{-1/2} \quad \text{(en } u\text{)} \tag{15-30}$$

Esta es la llamada *fórmula semiempírica de la masa* porque los parámetros a_1 hasta a_5 se obtienen empíricamente ajustando las masas que se miden. Weizsacker en 1935, desarrolló por

primera vez una fórmula de este tipo. Desde esa fecha los parámetros han sido determinados en varias ocasiones. Un conjunto que proporciona buenos resultados es

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.01691 \\ a_2 &= 0.01911 \\ a_3 &= 0.000763 \qquad \text{(en } u\text{)} \qquad (15\text{-}31) \\ a_4 &= 0.10175 \\ a_5 &= 0.012 \end{aligned}$$

Utilizando estos parámetros, la fórmula proporciona una gran concordancia con el comportamiento promedio de las masas medidas de todos los núcleos estables excepto aquellos con A muy pequeña. En la figura 15-10, se muestra una comparación en la que la curva suave es $\Delta E/A$ calculada a partir de la suma de los términos de volumen, de superficie, de Coulomb y de asimetría. En la figura 15-12 se muestran estos términos individualmente. La fórmula semiempírica de la masa es de gran utilidad práctica porque es una fórmula simple que predice con considerable precisión las masas y, por lo tanto, las energías de enlace, de más de 200 núcleos estables y otros muchos más núcleos inestables. Como se verá en el siguiente ejemplo, las predicciones de la energía de enlace nuclear pueden conducir inmediatamente a otras predicciones de cantidades de interés.

Ejemplo 15-7. Utilizar la fórmula semiempírica de la masa para predecir la energía de enlace que estará disponible si un núcleo de $^{92}U^{235}$ captura un neutrón. Esta es la energía que induce la fisión del núcleo $^{92}U^{236}$ que se forma en la captura.
La energía de enlace es

$$E_n = \{[M_{92,235} + M_{0,1}] - [M_{92,236}]\}c^2$$

El término en el primer paréntesis cuadrado es la masa de un átomo $^{92}U^{235}$ más la masa de un neutrón, que son los constituyentes del átomo $^{92}U^{236}$ cuya masa aparece en el segundo paréntesis cuadrado. Como la

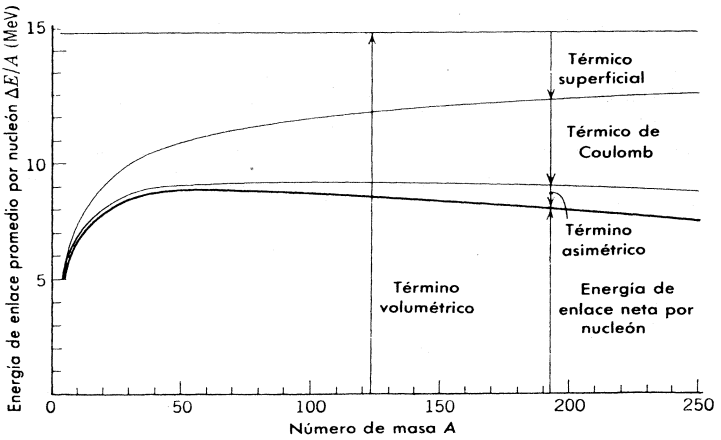


FIGURA 15-12
Ilustración de cómo los términos de volumen, de superficie, de Coulomb y de asimetría de la fórmula semiempírica de la masa se combinan para producir la energía de enlace por nucleón.

masa del neutrón $M_{0,1}$, es precisamente $1.008665u$, los primeros dos términos de la fórmula semiempírica de la masa (15-30), se cancelan en la expresión para E_n. Se obtiene entonces

$$\begin{aligned}
E_n &= \left\{\left[-a_1(235) + a_2(235)^{2/3} + a_3\frac{(92)^2}{(235)^{1/3}} + a_4\frac{(92 - 235/2)^2}{235}\right]\right. \\
&\quad \left. - \left[-a_1(236) + a_2(236)^{2/3} + a_3\frac{(92)^2}{(236)^{1/3}} + a_4\frac{(92 - 236/2)^2}{236} - \frac{a_5}{(236)^{1/2}}\right]\right\} c^2 \\
&= \left\{a_1 - a_2[(236)^{2/3} - (235)^{2/3}] + a_3(92)^2\left[\frac{1}{(235)^{1/3}} - \frac{1}{(236)^{1/3}}\right]\right. \\
&\quad \left. - a_4\left[\frac{(26.0)^2}{236} - \frac{(25.5)^2}{235}\right] + \frac{a_5}{(236)^{1/2}}\right\} c^2 \\
&\simeq \{0.0169 - 0.0191 \times 0.11 + 0.00076 \times 1.9 - 0.1018 \times 0.097 + 0.012 \times 0.065\}c^2 \\
&= \{0.0169 - 0.0021 + 0.0014 - 0.0099 + 0.0008\}c^2 \\
&= \{0.0071u\}c^2 = 6.6 \text{ MeV}
\end{aligned}$$

donde se ha utilizado (15-20) par convertir a MeV.

Si el neutrón posee una energía cinética despreciable antes de ser capturado, el núcleo de $^{92}U^{236}$ se forma en un estado cuya energía de excitación es igual a E_n. Como se discutirá ampliamente en el siguiente capítulo la energía de excitación frecuentemente se traduce en una vibración del núcleo en la que oscila entre una posición de elongación (teniendo un momento cuadrupolar positivo) y una posición aplanada (teniendo un momento cuadrupolar negativo). Esta vibración no puede realizarse sin la energía de excitación ya que el término de superficie de la fórmula semiempírica para la masa inhibe las desviaciones del núcleo de la forma aproximadamente esférica que posee en su estado base. Cuando el núcleo tiene una elongación máxima el efecto del término de Coulomb puede ocasionar que se fisione.

En la tecnología de reactores nucleares el hecho de que E_n para la captura de un neutrón por un núcleo $^{92}U^{238}$ sea menor en aproximadamente 1.5 MeV que el valor que se acaba de calcular para la captura por $^{92}U^{235}$ es de gran importancia. Los términos en las expresiones precedentes tienen aproximadamente los mismos valores excepto que la contribución del término de apareamiento (el último término) es negativo en lugar de positivo. Como todos los núcleos ^{92}U requieren de una excitación de aproximadamente 6 MeV para sobreponerse al término de inhibición de la superficie, el $^{92}U^{238}$ se fisionará únicamente si el neutrón que captura trae más de aproximadamente 1 MeV de energía cinética, además de su energía de enlace. Se verá que ésto quiere decir que el $^{92}U^{238}$ no es muy útil en la "reacción en cadena" que tiene lugar en los reactores. ◀

El modelo de la gota es el *modelo nuclear* más antiguo y más clásico. Cuando se desarrolló por primera vez la fórmula semiempírica de la masa, se tenían disponibles datos de masas pero no se conocía mucho más que eso acerca de los núcleos. Los parámetros eran totalmente empíricos y no se tenía ni siquiera un conocimiento cualitativo de los términos de asimetría y apareamiento. Sin embargo, la fórmula fue significativa porque describió con bastante exactitud las masas de cientos de núcleos en términos de sólo 5 parámetros. En la actualidad, ya se tiene una visión más profunda sobre el origen de los dos términos mencionados. El parámetro más importante, el término del volumen a_1 ya no es puramente empírico. La *teoría* nuclear ha sido desarrollada a tal punto que predice, razonablemente bien, el valor de a_1, en términos de las propiedades detalladas de las fuerzas nucleares. La teoría nuclear, que en una gran parte se debe al trabajo de Brueckner, es muy similar a la teoría de Hartree del átomo en el sentido de que implica cálculos autoconsistentes para un sistema de fermiones, sin embargo, los cálculos son aún más complicados debido a la complicada naturaleza de las fuerzas nucleares. No se hará ningún intento de describirlas.

15.6 Números mágicos

El modelo de la gota proporciona una buena descripción del comportamiento promedio de núcleos en lo que respecta a su masa y su energía de enlace. Como la energía de enlace es una

medida directa de su estabilidad—entre mayor sea la energía de enlace de un núcleo mayor será su estabilidad—el modelo de la gota describe bien el comportamiento promedio de los núcleos con respecto a su estabilidad. Sin embargo, núcleos con ciertos valores de Z y/o N muestran desviaciones significativas de este comportamiento promedio al ser desusadamente estable. Estos valores de Z y/o N son los *números mágicos*

$$Z \text{ y/o } N = 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 \qquad (15\text{-}32)$$

Esta situación es análoga a la rara estabilidad de las capas electrónicas de un gas noble que contiene $Z = 2, 10, 18, 36, 54, 86$ electrones. Sin embargo, en el caso nuclear las indicaciones no son tan pronunciadas como en el caso atómico, y es necesario considerar varios de ellos para demostrar el carácter "mágico" de los números citados en (15-32). Las dos más convincentes son:

1. Los núcleos prefieren tener Z y/o N mágico. Esto se puede ver si se examina la figura 15-11. Para citar dos ejemplos, existen seis isótopos estables para $Z = 20$, mientras que el número promedio de isótopos estables en esa región es aproximadamente dos. Para $Z = 70$ existen diez isótopos estables, mientras que el número promedio en esa región de la tabla periódica es aproximadamente cuatro. Todas las explicaciones posibles de como los núcleos se formaron originalmente relacionan abundancia con estabilidad; es decir, entre más estable es un tipo de núcleo particular más abundante es.

2. En la figura 15-10 se muestra que la energía de enlace promedio por nucleón es significativamente mayor para los núcleos que tienen Z y/o $N = 2$ u 8 que lo que sería para núcleos vecinos. El ejemplo más sobresaliente es $^2He^4$, para el cual $Z = N = 2$. El efecto es aún más grande si se considera una medida de estabilidad más sensible que $\Delta E/A$. Esto es E_n o E_p la energía mínima requerida para separar un neutrón, o un protón, del núcleo; esto es generalmente llamado *energía de enlace del "último" neutrón o protón*. Como ejemplo, para $^2He^4$ el valor E_n es 20.6 MeV (es decir, se requiere esta cantidad de energía para producir la reacción $^2He^4 \rightarrow {}^2He^3 + {}^0n^1$). El valor de E_p para $^2He^4$ es 19.8 MeV. Estos valores son anormalmente altos. En la figura 15-13 se muestra una gráfica de la diferencia entre el valor de E_n medido para numerosos núcleos y el valor predicho por la fórmula semiempírica de la masa. Excepto por el efecto del término de apareamiento el valor predicho es una función suave que decrece lentamente de aproximadamente 8 MeV para valores intermedios de N, hasta aproximadamente 6 MeV para valores grandes de N (como se vio en el ejemplo 15-5 donde se predijo E_n para $^{92}U^{236}$). La rara estabilidad de los núcleos con $N = 28, 50, 82, 126$ se muestra por la excepcionalmente grande energía requerida para extraer su último neutrón.

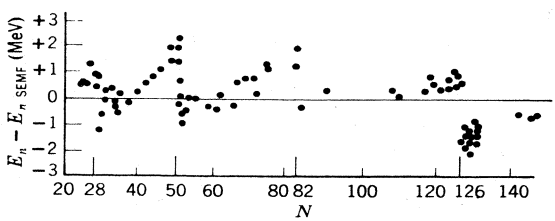


FIGURA 15-13
Diferencia entre la energía de enlace del último neutrón y la predicción de la fórmula semiempírica de la masa como función del número de neutrones en el núcleo. Estos datos proporcionan evidencias claras en favor de los números mágicos 28, 50, 82, y 126 de neutrones. Evidencias similares también demuestran que 20, 28, 50, y 82, son números mágicos para protones. Sin embargo, no existen evidencias concretas, en favor o en contra, en relación con 126 protones ya que los núcleos con valores de Z tan grandes, todavía no han sido detectados.

Existen otras evidencias, un tanto menos convincentes, en favor de los números mágicos, tales como el hecho de que para la mayoría de los emisores espontáneos de neutrones, como $^{8}O^{17}$, $^{36}Kr^{87}$, y $^{54}Xe^{137}$, N es igual a un número mágico más uno. Esto implica una afinidad desusadamente pequeña para el neutrón extra.

La analogía entre los números mágicos atómicos y nucleares motivó a mucha gente a buscar una explicación del fenómeno nuclear que fuera similar a la del fenómeno atómico. El estudiante recordará que el punto clave en esa explicación es la formación de capas cerradas por los electrones que se mueven *independientemente* en el potencial atómico. Sin embargo, cuando los números mágicos nucleares fueron analizados seriamente por primera vez, alrededor de 1948, parecía muy difícil de entender cómo podrían moverse los nucleones independientemente en un núcleo. La razón era que el modelo de la gota había sido dominante durante cierto número de años y parecía ser básico en este modelo, que un nucleón en un núcleo (con densidad $\sim 10^{18}$ kg/m^3!) interactuaría constantemente con sus vecinos por medio de la intensa fuerza nuclear. Si así fuera, el nucleón sería dispersado repetidamente al viajar por el núcleo y seguiría una trayectoria errática, parecida al movimiento Browniano más que al movimiento de un electrón que se mueve independientemente en la órbita de un átomo.

15.7 Modelo del gas de Fermi

Weisskopf fue el primero en señalar que existe una explicación simple de cómo los nucleones se pueden mover independientemente a través del núcleo en su estado base. La explicación se basa en el *modelo del gas de Fermi del núcleo.* Este modelo es esencialmente igual al modelo del gas de electrones libres, considerado en la sección 11-11 para los electrones de conducción en un metal. Supone que cada nucleón del núcleo se mueve en un *potencial neto* atractivo que representa el efecto promedio de sus interacciones con otros nucleones en el núcleo. El potencial neto posee una profundidad constante dentro del núcleo ya que la distribución de nucleones es constante en esa región; fuera del núcleo se va a cero en una distancia igual al alcance de las fuerzas nucleares. Por lo tanto, el potencial neto es aproximadamente igual a un pozo cuadrado finito tridimensional cuyo radio es un poco mayor que el radio nuclear y cuya profundidad será determinada en el ejemplo 15-8. En el estado base del núcleo, sus nucleones, que son todos fermiones con spin intrínseco $s = 1/2$, ocupan los niveles de energía del potencial neto, de modo tal que minimizan la energía total sin violar el principio de exclusión.

En la figura 15-14 se indican los estados cuánticos que se encuentran llenos por neutrones en el estado base de un núcleo. Como los protones son distinguibles de los neutrones, el principio de exclusión opera independientemente en los dos tipos de nucleones y se debe imaginar un diagrama separado e independiente que represente los estados cuánticos que llenan los protones. De estos diagramas resulta inmediatamente evidente por qué el *principio de exclusión* evita que los nucleones sean dispersados entre sí cuando el núcleo está en su estado base. El punto es que casi todos los estados energéticamente accesibles se encuentran ya completamente llenos, por lo tanto, escencialmente no podrán ocurrir colisiones excepto en aquellos casos en

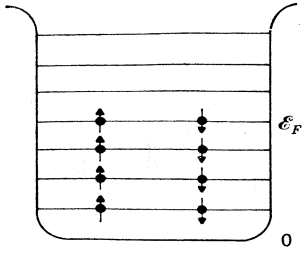


FIGURA 15-14
Representación esquemática de los niveles de energía que llenan los neutrones en el estado base de un núcleo. Los niveles más bajos se van llenando de acuerdo con las limitaciones del principio de exclusión, hasta la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$.

los que los dos nucleones del mismo tipo intercambien estados cuánticos. Sin embargo, el efecto neto de un intercambio tal, de dos partículas indistinguibles es el mismo que si no hubiese habido colisión. Desde luego que si existe un conjunto de estados degenerados, parcialmente llenos, a la energía de Fermi, los pocos nucleones en *estos* estados podrán chocar entre sí, pero una sola fracción pequeña del número total de nucleones podrán estar en dichos estados. Por lo tanto, se puede ver por qué *casi todos los nucleones que componen un núcleo se pueden mover libremente dentro del núcleo si este se encuentra en su estado base.*

Ejemplo 15-8. Evaluar la energía de Fermi de un núcleo típico y utilizar los resultados para determinar la profundidad del potencial nuclear neto.

La energía de Fermi $\mathscr{E}_F$, es la energía que se indica en la figura 15-14 para el nucleón que llena el nivel más alto del sistema, medido a partir del fondo del pozo de potencial. Se relaciona con la masa del nucleón M, la densidad de nucleones ρ, por medio de (11-57), que a continuación se escribe como

$$\mathscr{E}_F = \frac{\pi^2\hbar^2}{2M}\left(\frac{3}{\pi}\rho\right)^{2/3} \tag{15-33}$$

(Esta expresión se puede obtener directamente a partir de la ecuación para las energías de los niveles correspondientes a un pozo de potencial tridimensional, llenando simplemente sus niveles más bajos hasta el nivel de Fermi).

Considérese el gas de Fermi de neutrones en un núcleo esférico uniforme de radio

$$r' = aA^{1/3}$$

Para un núcleo típico, el número de neutrones es,

$$N \simeq 0.60A$$

Por lo tanto,

$$\rho \simeq \frac{N}{\frac{4}{3}\pi a^3 A}$$

de donde se obtiene,

$$\rho \simeq \frac{0.60A}{1.33\pi a^3 A} = \frac{0.45}{\pi a^3}$$

y la energía de Fermi será,

$$\mathscr{E}_F \simeq \frac{\pi^2\hbar^2(0.26)}{2Ma^2} \tag{15-34}$$

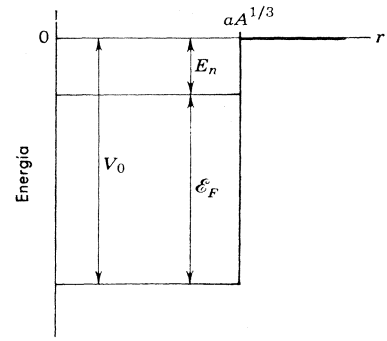


FIGURA 15-15
Ilustración de la relación entre la profundidad V_0 de un potencial nuclear de pozo cuadrado, de radio $r' = aA^{1/3}$, la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$, y la energía de enlace E_n del último neutrón.

Utilizando una constante para el radio de $a \simeq 1.1$ F consistente con las medidas de dispersión electrónica que se resumieron en (15-6), y evaluando los otros parámetros, se obtiene,

$$\mathscr{E}_F \simeq 43 \text{ MeV}$$

En la figura 15-15, se muestran las relaciones entre la profundidad del potencial V_0, la energía de Fermi $\mathscr{E}_F$, y la energía de enlace del último neutrón E_n, Como ya se mencionó en la sección anterior, E_n es aproximadamente igual a 7 MeV para un núcleo típico. Por lo tanto, para este núcleo la profundidad del potencial nuclear neto que actúa sobre sus neutrones es,

$$V_0 = \mathscr{E}_F + E_n \simeq 43 \text{ MeV} + 7 \text{ MeV} = 50 \text{ MeV}$$

Para el caso de neutrones, se obtiene un potencial nuclear neto muy parecido. (Desde luego que los protones también sienten un potencial de Coulomb neto ejercido por las cargas de los otros protones en el núcleo). ◀

A partir de numerosos estudios sobre el comportamiento de los nucleones a diferentes energías, existe evidencia de que la profundidad del potencial nuclear neto V_0, no es constante, sino que decrece lentamente y de modo aproximadamente lineal, a medida que la energía del nucleón aumenta. Esto no ocasiona dificultades, puesto que su efecto en la dinámica del movimiento del nucleón en el potencial neto puede ser completamente descrito introduciendo una masa efectiva del nucleón, de modo muy parecido al utilizado en la sección 13-7, cuando se trató el movimiento de un electrón de conducción, como partícula independiente, en el potencial neto de una red cristalina. Es decir, es posible continuar considerando a V_0 como constante con el valor que se obtuvo en el ejemplo 15-8, si se sustituye el valor real de la masa del nucleón M, por una *masa efectiva del nucleón* M^*. Además, como V_0 varía muy lentamente, M^* no es muy diferente de M por lo tanto, en la mayoría de las consideraciones que implican nucleones de no muy alta energía, se permite tomar $M^* = M$, es decir, ignorar completamente el hecho de que V_0 no es exactamente constante.

Existe también una dependencia de la profunidad del potencial nuclear neto V_0 con la diferencia entre el número Z de protones y el número N de neutrones, independientemente de que el potencial sea visto por un neutrón o un protón. Esto se describe agregando a V_0 un término $\Delta V_0 \propto \pm(N - Z)/A$, utilizando el signo más para el potencial visto por un protón, y el signo menos para el potencial visto por un neutrón. La dependencia es un resultado del principio de exclusión que restringe la interacción entre protones, o entre dos neutrones, a ciertos estados cuánticos, pero no impone ninguna restricción a la interacción entre un neutrón y un protón. Consecuentemente, la interacción atractiva entre dos nucleones de un núcleo es más fuerte entre un protón y un neutrón que entre dos protones o entre dos neutrones. Por lo tanto, el potencial nuclear neto que actúa sobre un protón, es más profundo que el que actúa sobre un neutrón, si el núcleo contiene más neutrones que protones en proporción al exceso fraccional de neutrones y viceversa si existe un exceso de protones. Esta dependencia juega un papel muy importante en el efecto que describe el término de asimetría de la fórmula semiempírica de la masa, como se indicará. En muchas otras consideraciones no es tan importante y se puede ignorar.

La tendencia de los núcleos a tener $Z = N$, también encuentra una explicación simple en el modelo del gas de Fermi. Considérese un núcleo con Z muy pequeña, para el cual la fuerza de Coulomb que actúa entre protones puede ser ignorada en comparación con la fuerza nuclear que es mucho más fuerte. En este núcleo se tienen dos gases de Fermi independientes, los neutrones y los protones. Ambos se mueven en potenciales nucleares netos que, en esta aproximación, son iguales, básicamente porque la fuerza nuclear que actúa entre neutrones es igual a la fuerza nuclear actuando entre protones, puesto que la fuerza nuclear es independiente de la carga. En esta aproximación, los niveles de energía de los dos sistemas deberán ser iguales, como se indica en la figura 15-16. Para un valor dado de A, la energía total del núcleo obviamente se minimiza si los niveles de energía se llenan con $Z = N$, ya que si esta condición se violara, los nucleones ocuparían niveles de energía más altos de los necesarios. Un tratamiento cuantitativo de este argumento conduce a la expresión matemática (15-27), utilizada en el término de asimetría de la fórmula semiempírica de la masa. La razón por la que aparece el factor $1/A$ en ese término, es que los niveles correspondientes al pozo de potencial tridimensional se encuentran menos espaciados entre mayor sea el valor de A. De esta manera, a medida que aumenta A, existe una

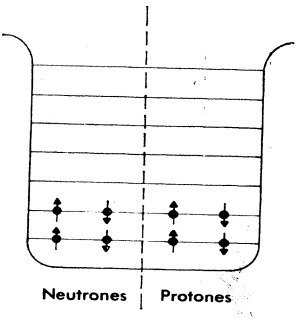


FIGURA 15-16
Representación esquemática de gases de Fermi independientes de neutrones y protones en el estado de mínima energía de un núcleo con Z muy pequeña, lo que se indica por un pozo cuadrado de aristas redondeadas.

disminución en el castigo energético asociado con la violación de la condición $N = Z$, que se describe por medio del factor $(Z - A/2)^2$.

El efecto del término $\Delta V_0 \propto \pm(N-Z)/A$ sobre la profundidad del potencial nuclear neto, como anteriormente se explicó, también contribuye de modo significativo a la presencia de un término de asimetría en la fórmula semiempírica de la masa y sus consecuencias. Considérese un núcleo típico que contiene N neutrones y Z protones, tal que $N > Z$. La contribución del término ΔV_0 en la energía de enlace total, por parte del los Z protones, se cancela por la contribución de los Z primeros neutrones. Sin embargo, existe una contribución no cancelada de los restantes $(N - Z)$ neutrones que disminuye la energía de enlace total, o aumenta la masa nuclear, en proporción a $(N - Z)^2/A \propto (Z - A/2)^2/A$.

15.8 Modelo de capas

El modelo del gas de Fermi, establece la validez de tratar el movimiento de los nucleones ligados en un núcleo, en términos del movimiento independiente de cada nucleón en un potencial nuclear neto. El siguiente paso,obviamente, será resolver la ecuación de Schrodinger para ese potencial y obtener una descripción detallada del comportamiento de los nucleones. Este procedimiento es el empleado en el *modelo de capas del núcleo*. El modelo de capas tiene una función en la física nuclear comparable a la que tiene la teoría de Hartree en la física atómica. Sin embargo, el modelo de capas es más rígido, ya que la forma exacta del potencial atómico neto, se determina internamente mediante la teoría atómica autoconsistente, mientras que la forma exacta del potencial nuclear neto debe ser insertada al modelo nuclear. Desde luego que existe alguna información general acerca del potencial nuclear neto, proveniente del modelo del gas de Fermi.

El procedimiento que se sigue en le modelo de capas, implica encontrar, en primer lugar, los niveles de energía para neutrones y protones para una forma supuesta del potencial neto de un núcleo particular. Es decir, si se considera a cada nucleón como moviéndose independientemente en un potencial nuclear neto $V(r)$, el nucleón tendrá niveles de energía permitidos que estarán determinados por la forma de $V(r)$, y que se encuentran resolviendo la ecuación de Schrodinger para ese potencial. Las únicas formas consideradas para el potencial neto son funciones esféricamente simétricas, $V(r)$, donde r es la distancia entre el nucleón y el centro del núcleo; otras formas aumentarían considerablemente la dificultad para resolver la ecuación de Schrödinger. Así como en la teoría de Hartree para átomos, se encuentra que la energía de un nivel de energía de un nucleón del potencial nuclear neto $V(r)$, depende de los números cuánticos n y l, que especifican el comportamiento radial y angular de un nucleón en ese nivel. El número cuántico l es el mismo que se ha encontrado en la física atómica cuando se trata con cualquier potencial esféricamente simétrico como $V(r)$. El número cuántico n que se utiliza en física nuclear se relaciona con, *pero no es lo mismo* que, el número cuántico de la física atómica que se simboliza con la misma letra. Debido a la forma aproximada de pozo cuadrado del potencial neto

$V(r)$ que aparece en física nuclear, es más conveniente en ese campo utilizar lo que se ha denominado *número cuántico de nodo radial n.*

La figura 15-17 contiene ilustraciones esquemáticas de algunos de los niveles de energía y eigenfunciones asociadas de los estados ligados de un pozo cuadrado tridimensional $V(r)$. A la izquierda, se indica la dependencia de n con las energías de los niveles para un pozo suficientemente ancho y profundo para ligar los estados 1*s*, 2*s* y 3*s*. Los comportamientos radiales de las eigenfunciones correspondientes $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ se indican graficando para cada uno la cantidad $rR(r)$, cuyo cuadrado es la densidad de probabilidad radial, utilizando el nivel de energía apropiado como un eje r. La notación 1*s* significa $n = 1$ y $l = 0$, como de costumbre. Obsérvese que para l fija, la energía aumenta al aumentar n. La razón es que para $n = 1$, $rR(r)$ contiene esencialmente la mitad de una oscilación dentro de la región del pozo, para $n = 2$, $rR(r)$ contiene dos medias oscilaciones y para $n = 3$, $rR(r)$ contiene tres medias oscilaciones. De esta manera, las eigenfunciones ψ para n mayores necesariamente tienen mayor curvatura, por lo que se requiere mayor energía cinética o total. Obsérvese también que el número de nodos dentro del pozo de la dependencia radial de r veces cada eigenfunción es justamente igual a n, como su nombre lo implica.

En la figura 15-17 existen estados ligados en el pozo para valores de l diferentes de $l = 0$. En el lado derecho de la figura la dependencia de l, para n fija, de las energías de los niveles y r veces el comportamiento radial de cada eigenfunción, se encuentran indicadas mostrándose para los estados 1*s*, 1*p*, y 1*d*. Dado que todos estos tienen $n = 1$, todas las $rR(r)$ tendrán un sólo nodo radial. De todas formas, el comportamiento radial de la eigenfunción ψ cambia al cambiar l debido a la propiedad expresada por (7-32)

$$\psi \propto R(r) \propto r^l \qquad r \to 0$$

y como se discutió con amplitud en los capítulos 7 y 9. Esta es la tendencia familiar de una partícula en estados de cualquier potencial esféricamente simétrico para el cual el impulso

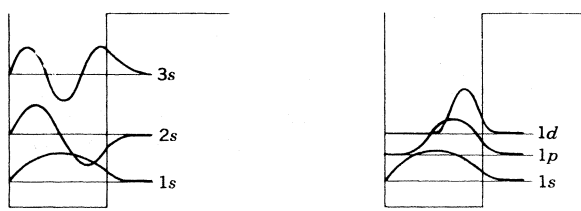


FIGURA 15-17

Izquierda: Ilustración cualitativa del producto rR de la coordenada radial r y la parte con dependencia radial R de la eigenfunción ψ para estados con $l = 0$ y $n = 1, 2, 3$, correspondientes al pozo cuadrado tridimensional que se muestra. Cada uno se construye utilizando su nivel de energía como eje r. Como la densidad de probabilidad radial es $P = r^2R^*R = (rR)^2$, si el estudiante puede visualizar los cuadrados de las funciones dibujadas, podrá hacer comparaciones con las densidades de probabilidad radial para los estados correspondientes al potencial de Coulomb de un átomo con un electrón, o bien, al potencial neto de Hartree de un átomo multielectrónico, examinando también las figuras 7-5 o 9-10. Al hacer lo anterior deberá tenerse en mente que el número cuántico n se utiliza de modo diferente en la física atómica. En esta figura se hace evidente el hecho de que el número cuántico de nodo radial, n, de la física nuclear, sólo especifica el número de nodos de rR dentro del pozo. *Derecha:* Lo mismo, pero para estados con $n = 1$ y $l = 0, 1, 2$. En esta figura se puede ver también la manera en que, lo que podría llamarse un efecto centrífugo, tiende a evitar que un nucleón se acerque a $r = 0$ a medida que el número cuántico del impulso angular orbital l, se hace mayor que cero.

angular orbital es constante, de modo que l es un buen número cuántico, evitando así el origen cada vez más a medida que l se vuelve mayor. Por lo tanto, al aumentar l la mitad de oscilación en las varias $rR(r)$ para $n = 1$, se encuentra contenida dentro de una región cada vez menor de eje r. De esta manera, las eigenfunciones ψ tienen curvaturas mayores y se encuentra que los niveles de energía correspondientes se encuentran más arriba en el pozo.

Los resultados relacionados con pozos cuadrados tridimensionales que son de mayores consecuencias son que las energías de niveles ligados aumentan conforme aumenta n, para una l dada, y que también aumenta al aumentar l, para una n dada. Además, el estudiante podrá observar, que cuando se utiliza el número cuántico de nodo radial n de la física nuclear, no hay restricción en cuanto al valor más grande posible de l para una n dada.

En física atómica sí existe esa restricción ya que el número cuántico n que se utiliza, denominado número cuántico principal, es simplemente igual a la suma del número cuántico de nodo radial y el número cuántico de impulso angular orbital. Es decir,

$$n_{\text{principal}} = n_{\text{radial}} + l$$

como el valor mínimo de n_{radial} es 1, el valor más grande posible de l para una $n_{\text{principal}}$ es $(n_{\text{principal}} - 1)$. la razón por la que se utiliza $n_{\text{principal}}$ en la física atómica es que cuando $V(r)$ es un potencial de Coulomb atractivo, $V(r) \propto -1/r$, del mismo modo en que la energía de un nivel aumenta al aumentar n_{radial} que resulta ser precisamente la forma como aumenta la energía al aumentar l. Por lo tanto, la energía de los niveles de un potencial de Coulomb no depende ni de n_{radial} ni de l, sino sólo de su suma, $n_{\text{principal}}$. Esto proporciona aún otro punto de vista acerca del origen de la degeneración de los niveles de energía del átomo de hidrógeno.

Considerando la parte radial de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial esféricamente simétrico $V(r)$, que es (7-17), se puede obtener mayor profundidad acerca de las propiedades de la cantidad rR. Por inspección se demuestra que lo anterior se puede escribir en la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2(rR)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right](rR) = E(rR)$$

se puede ver, que ésto es equivalente a la ecuación de Schrodinger para la función rR para movimiento en una dimensión r, excepto que el término $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2 = L^2/2\mu r^2$ se encuentra agregado al potencial $V(r)$. A este término frecuentemente se le denomina *potencial centrífugo*, por razones que pueden verse de la ecuación de conservación de la energía para una partícula clásica de masa μ que se mueve bajo la influencia de un potencial $V(r)$. Como la partícula se moverá en un plano que contiene al origen, puede ser descrita por las coordenadas r, θ, y la ecuación es

$$E = \frac{1}{2}\mu\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}\mu\left(\frac{r\,d\theta}{dt}\right)^2 + V(r)$$

Asimismo, el impulso angular orbital de la partícula es una constante

$$L = \mu r^2 \frac{d\theta}{dt}$$

de modo que la ecuación para la energía puede escribirse como,

$$E = \frac{1}{2}\mu\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \left[\frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]$$

Se puede ver que esta es la ecuación de conservación de la energía para el movimiento de una partícula clásica en una dimensión, si r es la coordenada unidimensional y se agrega el término $L^2/2\mu r^2$ al potencial $V(r)$. Este término positivo actúa como un potencial repulsivo tendiendo a mantener la partícula lejos del origen. Entre mayor sea el valor de L, más fuerte será el efecto, en concordancia con la conclusión usual. Obsérvese también que para $l = 0$ la ecuación diferencial para rR es matemáticamente idéntica a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo unidimensional para ψ. Esta es la razón por lo que las

gráficas de rR en la figura 15-17 para los estados 1*s*, 2*s*, y 3*s*, se parecen tanto a las gráficas de ψ para un potencial unidimensional de pozo cuadrado, en el sentido de que ambas son senoidales dentro del pozo y exponenciales decrecientes fuera de él. Sin embargo, no son idénticas ya que rR necesariamente tiene el valor cero para todos los estados en el punto $r = 0$.

Habiendo encontrado los niveles de energía del nucleón en el potencial nuclear neto $V(r)$, supuesto en la forma de un pozo cuadrado, el siguiente paso en el modelo de capas es "construir" el núcleo llenando los niveles en orden de energía creciente, con los N neutrones y Z protones que contiene el núcleo. El principio de exclusión limita la ocupación de cada nivel a $2(2l + 1)$ neutrones o protones. Esta ocupación corresponde a los dos valores posibles del número cuántico m_s, que especifica la orientación del impulso angular de spin intrínseco de un nucleón, y los $(2l + 1)$ valores posibles del número cuántico m_l, que especifica la orientación del impulso angular orbital del nucleón. Estos dos números cuánticos de la componente z del impulso angular son iguales a los de la teoría de Hartree de los átomos. Asimismo, el procedimiento utilizado para construir un núcleo llenando los niveles de energía nucleónicos es justamente el mismo que el utilizado en la teoría de Hartree para construir un átomo llenando sus niveles de energía electrónicos, excepto que en un núcleo existen partículas de dos especies distinguibles—los neutrones y los protones—a las cuales se aplica el principio de exclusión independientemente. Originalmente, se esperaba encontrar una forma particular para los potenciales $V(r)$ de los diversos núcleos, en la cual el ordenamiento y espaciamiento de los niveles de energía nucleónicos serían tales que, un nivel fuertemente ligado, conteniendo un número apropiado de neutrones y protones se llenaría en aquellos núcleos que tuviesen valores de N o Z iguales a los números mágicos—así como llenando niveles de energía electrónicos, fuertemente ligados, conduce a átomos de gas noble cuando Z es igual a un número mágico atómico. Se intentaron muchas formas detalladas y diferentes para la dependencia radial del potencial nuclear (incluyendo una apropiadamente denominada "potencial de la botella de vino", un pozo cuadrado con una prominencia centrada en el fondo, como el perfil del fondo de una botella de vino, lo que suprime de cierto modo la dependencia en l de la energía). Se encontró que *no hay* forma de $V(r)$ que conduzca siquiera al ordenamiento de los niveles de energía nucleónicos requerido para explicar los números mágicos.

El misterio de los números mágicos fue resuelto en 1949 por Mayer, e independientemente por Jensen, quienes introdujeron la idea de una interacción spin-órbita nuclear. Propusieron que cada nucleón en un núcleo experimenta además del potencial nuclear neto, una *interacción spin-órbita invertida fuerte* proporcional a $\mathbf{S}.\mathbf{L}$, el producto escalar entre los vectores de spin y momento angular orbital. Fuerte quiere decir que la energía de interacción es mucho mayor (aproximadamente 20 veces) que la que se predice utilizando la fórmula atómica para la interacción spin-órbita, (8-35), igualando $V(r)$ al potencial nuclear neto y m a la masa del nucleón. Invertido quiere decir que la energía del nucleón disminuye cuando $\mathbf{S}.\mathbf{L}$ es positiva, y aumenta cuando es negativo. Por lo tanto, el signo de la interacción es opuesto al signo de la interacción spin-órbita magnética que experimenta un electrón en un átomo; es decir, la energía de interacción es *negativa* cuando el momento angular total del nucleón $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L}$ tiene la *máxima* magnitud posible (es decir, cuando $\mathbf{S}$ y $\mathbf{L}$ son tan paralelos como sea posible y $\mathbf{S}.\mathbf{L}$ es positiva) sin embargo, como la magnitud de la interacción spin-órbita es proporcional a $\mathbf{S}.\mathbf{L}$, igual que para un electrón atómico, la magnitud del desdoblamiento de los niveles de energía nucleónicos será aproximadamente proporcional al valor del número cuántico l, igual que para los niveles de energía electrónicos. A pesar de que existen similaridades entre las interacciones spin-órbita nuclear y atómica, sus diferencias hacen evidente que la primera *no* es de origen *magnético*. En su lugar, es un atributo de la fuerza nuclear cuyo origen no se entiende aún completamente.

En el lado izquierdo de la figura 15-18, se muestra el ordenamiento y espaciamiento aproximado de los niveles de energía que llenan los nucleones en núcleos con potenciales $V(r)$ en la forma de pozos cuadrados con aristas redondeadas, como los potenciales que se muestran

en la figura 15-16. Al llenarse los niveles, y procediendo hacia arriba en la tabla periódica, la profundidad de los potenciales se mantiene constante mientras que sus radios aumentan en proporción a la raíz cúbica del número de nucleones que contienen en los niveles llenos. Las mismas características generales que se pueden ver en el lado izquierdo de la figura 15-18, se

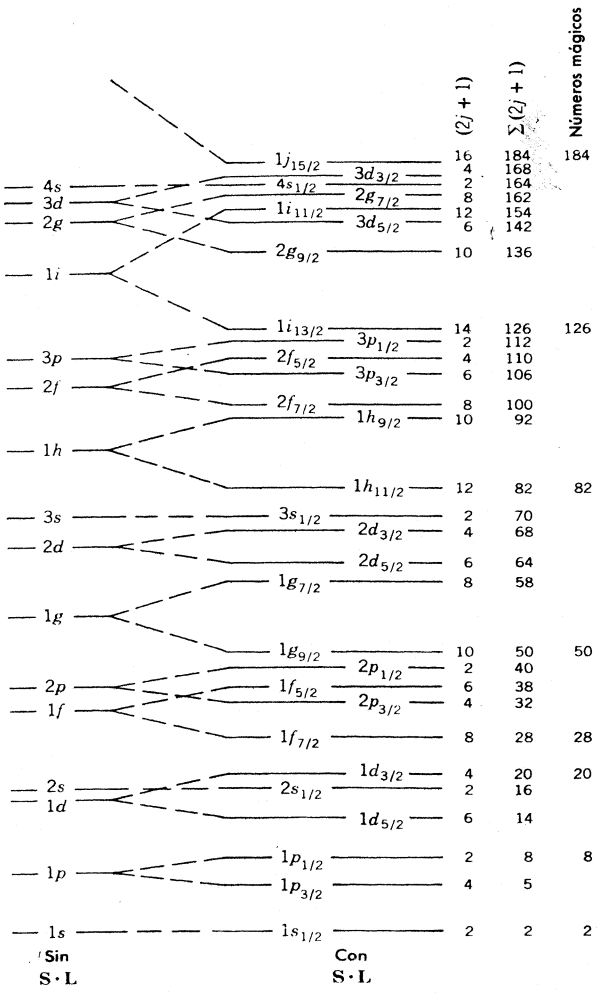


FIGURA 15-18

Izquierda: Orden en que se llenan los niveles correspondientes a pozos cuadrados con aristas redondeadas, sin interacción spin-órbita, a medida que la ocupación y el radio del pozo aumentan. *Derecha:* Niveles que aparecen cuando se añade una fuerte interacción $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ invertida. La columna marcada con $(2j + 1)$ muestra el número de nucleones iguales que pueden ocupar el nivel correspondiente sin violar el principio de exclusión. La columna marcada con $\Sigma\ (2j + 1)$ proporciona para cada nivel el número acumulado de nucleones que pueden estar en todos los niveles hasta ese nivel. En la última columna, aparecen niveles marcados con números mágicos por encima de los cuales aparecen intervalos de energías prohibidas significantes.

encuentran en todos los potenciales esféricamente simétricos que tienen una forma que guarda alguna semejanza con un pozo cuadrado atractivo. Desde luego que los detalles del ordenamiento y espaciamiento de los niveles de energía del nucleón dependen de los detalles de la competencia entre la dependencia en n y la dependencia l de la energía, y todo ésto depende de los detalles del comportamiento radial del potencial nuclear; sin embargo, cualquier potencial nuclear razonable proporciona esencialmente el mismo ordenamiento de los niveles de acuerdo con n y l, como el correspondiente a pozos cuadrados con aristas redondeadas, proporcionando asimismo intervalos prohibidos entre los niveles en, esencialmente, los mismos lugares. Si, como se vio en el ejemplo 15-8, el potencial nuclear neto está relacionado con la densidad de masa nuclear, los pozos cuadrados con aristas redondeadas son ciertamente las formas correctas para el potencial ya que reflejan los valores interiores constantes y los cambios bastante graduales en la superficie nuclear de las densidades de masa. Pero como ya se mencionó y como se especificará en el ejemplo 15-9, el ordenamiento y espaciamiento de los niveles de energía para estos potenciales, que se muestran en el lado izquierdo de la figura 15-18, no conduce a los números mágicos observados si no hay interacción spin-órbita.

En el lado derecho de la figura 15-18 se muestra cómo se desdoblan los niveles de energía nucleónicos por la interacción spin-órbita nuclear. En presencia de la interacción spin-órbita, m_l y m_s no son ya números cuánticos útiles puesto que las componentes z de los momentos angulares orbital y de spin intrínseco de un nucleón ya no son constantes cuando estos momentos angulares se acoplan por medio de la interacción. Por lo tanto, n, l, j, y m_j, se deben utilizar para denotar los niveles de energía desdoblados. El número cuántico j especifica la magnitud del momento angular total j, de un nucleón, que es la suma de sus momentos angulares de spin y orbital; m_j es el número cuántico que especifica la componente z de su momento angular total, J_z. Como resultado de la interacción spin-órbita, las energías de los niveles dependen tanto de j como de n y l y la j que es mayor (correspondiente al valor de J, o **S. L** que es más grande) produce la menor energía ya que el signo de la interacción spin-órbita nuclear está invertido. De acuerdo con el principio de exclusión, cada uno de estos niveles tiene una capacidad $(2j + 1)$, que es el número de valores posibles de m_j. Esto se muestra en la primera columna de la derecha en la figura. La segunda columna muestra la capacidad total de los niveles hasta, e incluyendo el nivel en cuestión. La tercera columna muestra la misma cosa para cada nivel que quede extraordinariamente por debajo del siguiente nivel hacia arriba. Como existen niveles que estarán desusadamente fuertemente ligados, se puede ver que el modelo de capas con una fuerte interacción spin-órbita invertida predice precisamente los números mágicos de (15-32).

La figura 15-18 se utiliza tan frecuentemente por los físicos nucleares que muchos de ellos la han memorizado. Un procedimiento más sencillo es construirla utilizando el acróstico

spuds if pug dish of pig

lo que quiere decir: (coma) papas si el puerco es malo. Tachando todas las vocales, excepto la última se obtiene

spdsfpgdshfpig

Este es el ordenamiento de l para todos los niveles no desdoblados, a través de aquellos que llevan al número mágico 126. Los valores de n son asignados fácilmente ya que el primer nivel s es $1s$, el segundo es $2s$, etc. El resto de la figura se construye aplicando un desdoblamiento spin-órbita invertido proporcional a l. Debe hacerse notar que la figura 15-18 no es un diagrama de niveles de energía para un núcleo particular; en su lugar proporciona el orden en que aparecen los niveles nucleares por abajo de la energía de Fermi cuando el radio del potencial nuclear aumenta proporcionalmente a $A^{1/3}$. Es decir, proporciona el orden en el que los niveles de mayor energía se llenan para los diversos núcleos. Asimismo indica las magnitudes relativas de la separación entre niveles adyacentes conforme se van llenando. Así, es análoga al diagrama que podría construirse para átomos utilizando únicamente el lado izquierdo de la figura 9-14.

Por último, debe mencionarse que existen evidencias teóricas y experimentales recientes que demuestran que puede haber algunos cambios pequeños pero importantes en la figura 15-18 respecto al orden como se llenan los niveles más altos en el caso de protones. Esto se estudiará en la sección 16-2.

Ejemplo 15.9. Utilizar la figura 15-18 para predecir los primeros cuatro números mágicos para núcleos con potenciales en la forma de pozos cuadrados con aristas redondeadas; (a) bajo la suposición de que no hay interacción spin-órbita, y (b) bajo la suposición de que existe una interacción spin-órbita invertida fuerte.

(a) Si no hay interacción spin-órbita la energía de los niveles nucleónicos será simplemente la que se muestra en el lado izquierdo de la figura. Recordando que la capacidad de cada nivel es $2(2l+1)$, y que $s, p, d, f, g, \ldots$.quieren decir $l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$, se ve que los primeros niveles y sus capacidades son, por orden creciente de energía: 1s, capacidad 2, 1p, capacidad 6; 1d, capacidad 10; 2s, capacidad 2; 1f, capacidad 14; 2p, capacidad 6; 1g, capacidad 18. El primer número mágico será el número de nucleones necesarios para llenar el primer nivel, es decir, 2. El siguiente número mágico será el número requerido para llenar los primeros dos niveles, es decir, $2 + 6 = 8$. Si el tercero y cuarto niveles se encuentran muy próximos en energía, como se indica en la figura, el siguiente número mágico será el número de nucleones necesarios para llenar los primeros cuatro niveles, es decir, $2 + 6 + 10 + 2 = 20$. Hasta aquí, estos números mágicos concuerdan con los números mágicos observados: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Sin embargo, el siguiente número mágico que se predice en ausencia de la interacción spin-órbita, será el número de nucleones necesarios para llenar los primeros cinco niveles, o los primeros seis niveles, dependiendo de que el quinto y sexto niveles sean o no considerados muy próximos en energía. Las dos posibilidades son, $2+6+10+2+14 = 34$, o bien $2 = 6 + 10 + 2 + 14 + 6 = 40$. Ambos difieren del número mágico observado 28. Realizando una numerología similar se hace evidente que los números mágicos más altos predichos también difieren respecto a los observados y que no hay manera de eliminar la discrepancia rearreglando el espaciamiento, o aún el ordenamiento, de los niveles de energía nucleónicos en ausencia de la interacción spin-órbita.

(b) Si existe una interacción spin-órbita invertida fuerte, los niveles nucleónicos se desdoblan de acuerdo con el patrón de ocupación que se muestra en el lado derecho de la figura 15-18. La figura también muestra la capacidad $(2j+1)$ de cada nivel así como la suma $\Sigma(2j+1)$ de su capacidad y la capacidad de los niveles de energía inferiores, como se explicó en el texto. El desdoblamiento debido a la interacción spin-órbita no altera los primeros tres números cuánticos predichos, 2, 8, 20, como es evidente de la figura, de modo que se mantiene la concordancia con las observaciones. Sin embargo, también se obtiene concordancia con los números mágicos más altos. Por ejemplo, la interacción spin-órbita desdobla el nivel 1f en los niveles $1f_{7/2}$, cuya energía disminuye, y el nivel $1f_{5/2}$, cuya energía aumenta. Como la capacidad del nivel $1f_{7/2}$ es $(2j+1) = 2 \times 7/2 + 1 = 8$, el número mágico que se predice después de 20 será $20 + 8 = 28$ en acuerdo con las observaciones. El número mágico observado, 50, se obtiene porque el nivel $1g_{9/2}$ con capacidad $2 \times 9/2 + 1 = 10$, disminuye su energía y, por lo tanto, se acerca al nivel 2p. Como el número total de nucleones que llenan los niveles hasta e incluyendo el 2p es 40, como se vió anteriormente, el número total que llena los niveles hasta e incluyendo el $1g_{9/2}$ será $40 + 10 = 50$. El origen del resto de los números mágicos es evidente, examinando la figura 15-18. Obsérvese que el hecho de que el desdoblamiento spin-órbita aumenta en magnitud, al aumentar l, juega un papel importante en lograr la concordancia con las observaciones. ◀

15.9 Predicciones del modelo de capas

El modelo de capas puede hacer mucho más que sólo predecir los números mágicos y sus consecuencias. Por ejemplo, puede predecir el momento angular total de los estados base de casi todos los núcleos. Considérense núcleos para los cuales ambos N y Z son mágicos tales como $^{8}O^{16}$, $^{20}Ca^{40}$, y $^{82}Pb^{208}$. De acuerdo con el modelo, contendrán solo subcapas completamente llenas de neutrones y protones y, por lo tanto, el principio de exclusión requiere que, para ambos sistemas de neutrones y protones, los vectores de momento angular orbital y de spin intrínseco, para todos los nucleones, se acoplen (se sumen) para dar un momento angular total igual a cero. (La prueba formal de este requisito obvio es esencialmente la misma que se da en

el apéndice K). Esto concuerda con las medidas, estudiadas en la sección 15-2, que demuestran que para estos núcleos el número cuántico del momento angular total, llamado spin nuclear, es $i = 0$. Para los núcleos que contienen un número mágico de nucleones de un tipo y un número mágico más, o menos, un nucleón del otro tipo, el principio de exclusión requiere que el momento angular total del núcleo sea igual al momento angular total del nucleón extra, o bien (compárese con el apéndice K) del agujero. Para esos núcleos, el spin nuclear i deberá ser igual al número cuántico de momento angular total j, del nucleón extra, o del agujero.

Ejemplo 15-10. Utilizar la figura 15-18 y el argumento del principio de exclusión que se acaba de mencionar, para predecir los spin correspondientes a los estados base de los siguientes núcleos: (a) $^{7}N^{15}$ (b) $^{8}O^{17}$, (c) $^{19}K^{39}$, (d) $^{82}Pb^{207}$, y (e) $^{83}Bi^{209}$.

(a) La figura 15-18 predice que el $^{7}N^{15}$ es doblemente mágico excepto que hay un agujero de protón en la subcapa $1p_{1/2}$. Por lo tanto, deberá tener un spin i igual al valor $j = 1/2$ correspondiente a esa subcapa. Esta predicción concuerda con las mediciones. También se obtendrá desde un punto de vista un tanto diferente en el ejemplo 15-11.

(b) La figura predice que el $^{8}O^{17}$ es deoblemente mágico excepto por un neutrón extra que se encuentra en la subcapa $1d_{5/2}$. Por lo tanto, deberá tener $i = j = 5/2$, en concordancia con las mediciones.

(c) El $^{19}K^{39}$ se predice como doblemente mágico excepto por un agujero de protón en la subcapa $1d_{3/2}$ por lo que deberá tener $i = j = 3/2$. Y así es.

(d) De acuerdo con la figura 15-18 el $^{82}Pb^{207}$ es doblemente mágico excepto por un agujero de neutrón en la subcapa $1i_{13/2}$. Así, el principio de exclusión predice que deberá tener un spin $i = j = 13/2$. Sin embargo, el spin medido es $i = 1/2$. Esta no es una falla del principio de exclusión, sino una falla de la figura 15-18 como se explicará en breve.

(e) La figura predice que el $^{83}Bi^{209}$ es doblemente mágico excepto por un protón extra en la subcapa $1h_{9/2}$. De esta manera, su spin deberá ser $i = j = 9/2$. Esto concuerda con las medidas. ◀

Ahora considérense núcleos para los cuales N y/o Z no son números cercanos a los mágicos. Estos núcleos contienen subcapas con varios nucleones o agujeros, y el problema de cómo los momentos angulares orbital y de spin intrínseco de estos nucleones se acoplan, es muy parecido al problema estudiado en el capítulo 10 en relación con el comportamiento de los electrones en los átomos. Sin embargo, existen importantes diferencias entre átomos y núcleos en este respecto. Una es que la mayoría de los átomos obedecen lo que se ha llamado acoplamiento *LS*, mientras que todos los núcleos obedecen, esencialmente, lo que se ha llamado acomplamiento *JJ*. La diferencia en los esquemas de acoplamiento de los momentos angulares que obedecen átomos y núcleos tiene que ver con el hecho de que la interacción spin-órbita es relativamente débil en átomos, y bastante fuerte en núcleos (ver la sección 10-3). Por lo tanto, en los núcleos el acoplamiento es dominado por la interacción spin-órbita. Es decir, en el *acoplamiento JJ* el momento angular de spin intrínseco de un nucleón se acopla fuertemente con su propio momento angular orbital para formar el momento angular total para ese nucleón. Esto sucede para cada nucleón. Por último, los diferentes momentos angulares totales que han sido formados se acoplan menos fuertemente para formar el momento angular total del núcleo. Otra diferencia, entre los acomplamientos de momentos angulares de átomos y núcleos es que el acoplamiento final que forma el momento angular total del núcleo es particularmente simple. Esto es evidente del hecho de que todos los núcleos con N par y Z par tienen un momento angular total dado por $i = 0$, como se afirmó en la sección 15-2. Una posible explicación es que siempre que se tenga un número par de nucleones de una especie dada en una subcapa, los momentos angulares totales de estos nucleones se acoplan para producir un momento angular total del núcleo igual a cero. Esto es verdad, pero el acoplamiento es aún más simple. Existen bastantes evidencias que indican que los momentos angulares totales de los protones en una subcapa se acoplan en *pares*, de modo que el momento angular total de *cada* par de protones es igual a cero y lo mismo sucede para el caso de pares de neutrones en una subcapa.

Algunas de estas evidencias en favor de la tendencia al apareamiento ya han sido presentadas anteriormente en el análisis relacionado con la abundancia de los núcleos estables y la fórmula semiempírica de la masa. Resulta de una *interacción de apareamiento*. Esta es una interacción,

nuclear residual, es decir, una parte de la interacción nuclear total que experimentan los nucleones y que no está descrita por el potencial neto esféricamente simétrico, $V(r)$, del modelo de capas, o bien, por la interacción spin-órbita. La interacción de apareamiento, a pesar de no estar descrita por estos atributos del modelo de capas, puede ser predicha a partir de ellos. El potencial neto $V(r)$ representa las interacciones que, *en promedio,* experimenta un nucleón. La interacción de apareamiento representa *una desviación de la interacción promedio* $V(r)$ que aparece cuando un nucleón se encuentra particularmente cerca de otro nucleón con el cual puede tener una *interacción individual.* Como se mencionó en la sección 15-7, implica la colisión de nucleones en estados degenerados de una subcapa parcialmente llena. Un par de nucleones que tienen los mismos valores j pero valores opuestos de m_j (por ejemplo, $j = 5/2$, $m_j = 5/2$; $j = 5/2$, $m_j = -5/2$) chocan entre sí en una interacción tal y después de la colisión ocupan estados previamente vacíos que tienen valores diferentes pero opuestos de m_j (por ejemplo, $j = 5/2$, $m_j = 3/2$; $j = 5/2$, $m_j = -3/2$). Es evidente que el momento angular se conserva en dichas condiciones y que las colisiones no son inhibidas por el principio de exclusión. La energía del sistema se reduce ya que al chocar, los nucleones se encuentran muy próximos entre sí y el principio de exclusión no les impide que ejerzan el uno al otro la fuerza nuclear de corto alcance fuertemente atractiva.

Debido a que la fuerza nuclear ejercida entre dos nucleones es fuerte y de corto alcance, las desviaciones del promedio descritas por la interacción de apareamiento son pronunciadas. Por lo tanto, la interacción de apareamiento es bastante fuerte, aunque no tan fuerte como la interacción spin-órbita. Es de corto alcance, al igual que la fuerza nuclear que conduce a la fluctuación que representa. Es atractiva porque dicha fuerza es atractiva. Una interacción similar que resulta de una desviación de promedio, denominada interacción residual de Coulomb, aparece en el tratamiento de átomos, como se estudió en la sección 10-3. En átomos, la interacción residual de Coulomb *repulsiva* entre electrones de una subcapa tiende a producir acoplamiento *paralelos* de sus momentos angulares. En núcleos, la tendencia es formar acoplamientos *antiparalelos* ya que la interacción nuclear residual entre los nucleones es *atractiva.* La razón puede entenderse utilizando argumentos similares a los utilizados para acoplamientos atómicos (ver la sección 10-3), en el caso de una interacción residual atractiva. Brevemente, lo que estos argumentos demuestran es que dado que dos nucleones de la *misma especie* están descritos por eigenfunciones totales antisimétricas estarán más próximos entre sí, en promedio, si sus momentos angulares de spin son esencialmente antiparalelos. Asimismo estarán más próximos entre sí en promedio, si sus momentos angulares orbitales son esencialmente antiparalelos ya que en ese caso se moverán en direcciones opuestas en torno a la misma "órbita" y, por lo tanto, frecuentemente se pasan entre sí. Así, formarán una pareja muy junta si sus vectores de momento angular total son esencialmente antiparalelos. Cuando forman una pareja tal con momento angular total cero, la fuerza nuclear atractiva que actúa entre ellos realiza una mayor contribución a la energía de enlace del núcleo y por lo tanto hace que el núcleo sea más estable. Consecuentemente, existe la tendencia a formar pares, y a mantener esencialmente vectores de momento angular total antiparalelos a lo largo de la secuencia de colisiones entre sí. Estas colisiones cambian la orientación de su órbita pero siempre se mueven en direcciones opuestas sea cual fuere la órbita en que se encuentren.

La disminución en la energía que resulta del acoplamiento de un par de nucleones del mismo tipo, o *energía de apareamiento,* da lugar a la preferencia de los núcleos a tener Z par y N par y al término de apareamiento en la fórmula semiempírica de la masa. También es responsable de las fallas ocasionales de la figura 15-18 en la predicción correcta de los spin nucleares en el estado base. Para el caso del $^{82}Pb^{207}$, considerado en el ejemplo 15-10, el spin nuclear es 1/2 ya que es energéticamente favorable que un neutrón de la subcapa $3p_{1/2}$ forme pareja con el neutrón en la subcapa $1i_{13/2}$ dejando un agujero en la subcapa $3p_{1/2}$. La razón es que la energía de apareamiento es mayor entre mayores sean los valores de l de los componentes del par, ya que al aumentar l los nucleones se mueven de un modo más clásico (es decir, más como partículas confinadas a órbitas en un plano), y ésto aumenta el traslape de sus funciones de onda (es decir,

se juntan más). Como las dos subcapas tienen aproximadamente la misma energía, el efecto de apareamiento domina.

Si una subcapa contiene un número par de nucleones, sus momentos angulares totales deberán acoplarse por parejas para dar un momento angular total cero. Si se agrega un nucleón más, será muy difícil que pueda perturbar a los pares que ya existen, puesto que la interacción de apareamiento es bastante fuerte. Por lo tanto, el momento angular total de toda la subcapa se deberá exclusivamente al nucleón impar. Por lo tanto, *la totalidad del momento angular de un núcleo con A impar será debido al momento angular total de un sólo nucleón impar en la subcapa ocupada de mayor energía y el spin nuclear i será igual al valor del número cuántico j de esa subcapa.* Salvo una o dos excepciones, esta regla permite explicar los valores observados de i para todos los núcleos con A impar en términos de la figura 15-18. Sin embargo, es necesario tomar en cuenta algunos intercambios ocasionales del orden de ocupación de algunos de los niveles muy próximos entre sí debido al efecto de apareamiento discutido en el párrafo anterior.

Para núcleos con A impar, el modelo de capas ha tenido mucho éxito en la predicción de las *paridades* de las eigenfunciones nucleares, es decir, independientemente de que sean funciones pares o impares de las variables espaciales (ver (8-44) y (8-45)). Como en el modelo de capas los nucleones se mueven básicamente de modo independiente, una eigenfunción nuclear se puede escribir como el producto de las eigenfunciones para cada uno de sus nucleones—igual que en la teoría de Hartree de los átomos. En el ejemplo 15-11 se verá que la paridad de la eigenfunción nuclear es justamente la paridad de la eigenfunción correspondiente al nucleón impar. Como en (8-47) se demuestra que la paridad de esa eigenfunción está determinada por $(-1)^l$, se encuentra que *si el nucleón impar está en una subcapa en la que l es par, la paridad nuclear es par: si l es impar, la paridad es impar.* En el próximo capítulo se verá que la paridad nuclear es extremadamente importante en la determinación de los tipos de transiciones que ocurren en ciertas clases de radiactividad y reacciones nucleares ya que existen reglas de selección que involucran la paridad.

Debe ser evidente que el modelo de capas predice que para núcleos con A par, *con N y Z pares, el spin nuclear es* $i=0$ y la paridad nuclear es par. Esto concuerda con el experimento. Para núcleos con A par con N y Z impares, el valor de j y la paridad de las eigenfunciones se predicen para cada uno de los nucleones impares. De lo anterior, se puede obtener inmediatamente la paridad nuclear, pero sólo es posible fijar límites en el spin nuclear y decir que sólo puede tener un valor entero. Sin embargo, existen muy pocos núcleos con N y Z impares. Los argumentos de los dos últimos párrafos, pueden extenderse con el fin de proporcionar información acerca de los spin y paridades de los estados excitados nucleares más bajos. Como se verá más adelante, esta información sólo es confiable si los valores de N y/o Z son cercanos a los números mágicos.

Ejemplo 15-11. Predecir el spin en el estado base y la paridad de los siguientes núcleos: (a) $^{8}O^{16}$, (b) $^{8}O^{17}$, (c) $^{8}O^{18}$, (d) $^{7}N^{15}$, (e) $^{7}N^{14}$.

(a) El núcleo $^{8}O^{16}$ posee N y Z pares, siendo también doblemente mágico, ya que ambos N y Z son iguales a 8. Tiene dos neutrones en la subcapa $1s_{1/2}$ que se acoplan formando un par para dar un impulso angular total igual a cero. Ambos neutrones son descritos por eigenfunciones de paridad par, ya que $l=0$, por lo que la parte que a ellos corresponde de la eigenfunción producto es par. Existen cuatro neutrones en la subcapa $1p_{3/2}$ que se acoplan formando dos pares, ambos con momento angular total igual a cero. Estos cuatro neutrones están descritos por eigenfunciones impares ya que $l=1$, pero el producto de cuatro funciones impares es una función par, por lo que la parte que les corresponde en la eigenfunción producto del núcleo también es par. Hay dos neutrones en la subcapa $1p_{1/2}$ que forman un par de momento angular total igual a cero. Contribuyen con dos eigenfunciones impares a la eigenfunción producto del núcleo, de modo que la parte que les corresponde en la eigenfunción producto también es par. Exactamente las mismas afirmaciones se aplican a los protones. El resultado neto es que el spin nuclear es cero y la paridad nuclear es par.

(b) El $^{8}O^{17}$ es un núcleo con N impar y Z par. Sus neutrones y protones hacen lo mismo que los correspondientes al $^{8}O^{16}$, excepto que posee un neutrón no apareado extra en la subcapa $1d_{5/2}$. Este

proporciona al núcleo un spin de $i = 5/2$. La paridad de la eigenfunción del neutrón no apareado es par, puesto que $l = 2$, de modo que la paridad nuclear es par.

(c) El $^{8}O^{18}$ es un núcleo con N y Z pares. El spin y la paridad predichos son $i = 0$ y par. Las razones son que existen dos neutrones en la subcapa $1d_{5/2}$ formando un par de momento angular total cero, ambos con eigenfunciones pares.

(d) El $^{7}N^{15}$ es un núcleo con N par y Z impar. Sus neutrones y protones se comportan como los del $^{8}O^{16}$, excepto que posee un protón no apareado en la subcapa $1p_{1/2}$. Este protón no apareado le proporciona al núcleo un spin $i = 1/2$. Como la eigenfunción para el protón es impar, puesto que $l = 1$, la paridad nuclear es impar. Obsérvese que el spin nuclear había sido predicho, en el ejemplo 15-10, desde un punto de vista un tanto diferente.

(e) El $^{7}N^{14}$ es un núcleo con N y Z impares. Posee un protón no apareado en la subcapa $1p_{1/2}$ así como también un neutrón no apareado en la subcapa $1p_{1/2}$. Ambos poseen un número cuántico de impulso angular total, $j = 1/2$. No se puede precisar cuál debe ser el spin nuclear sin saber cómo los momentos angulares de estas dos partículas diferentes se acoplan. Pero puede decirse que sólo existen dos posibilidades para los spin nucleares, $i = 0$ o $i = 1$. Experimentalmente se demuestra que el valor correcto es $i = 1$. Se puede predecir, sin ambigüedad, que la paridad nuclear será par ya que tanto el protón no apareado como el neutrón no apareado contribuye con eigenfunciones impares a la eigenfunción producto del núcleo y el producto de dos funciones impares es una función par. Esta predicción se comprueba experimentalmente, como todas las predicciones hechas en las primeras partes de este ejemplo. ◀

El modelo de capas, no ha tenido tanto éxito en la predicción de los momentos dipolares magnéticos nucleares. Afirma, que el momento dipolar magnético de un núcleo con A impar (es decir, N par y Z impar, o N impar y Z par) se debe totalmente al correspondiente a un solo nucleón no apareado. La razón es que los momentos dipolares magnéticos de los otros nucleones deberían cancelarse por pares, si sus impulsos angulares totales hacen lo mismo. En las dos partes de la figura 15-19 se muestran los datos experimentales para núcleos con N par y Z impar y para núcleos con N impar y Z par. Los datos fueron obtenidos de la forma indicada en la sección 15-2. En la figura también se muestra las llamadas *líneas de Schmidt*, que representan las predicciones del modelo de capas para los casos en los que los momentos angulares de spin y orbital del nucleón no apareado son, esencialmente paralelos o esencialmente antiparalelos, esto es para los dos casos posibles $j = l + 1/2$ o $j = l - 1/2$. Los datos muestran sólo una tendencia, apenas reconocible, de seguir las predicciones cualitativas del modelo de capas.

La falla en el modelo se debe a la suposición de que el momento dipolar magnético nuclear es debido totalmente al nucleón no apareado. No es cierto que los demás nucleones estén *siempre* apareados con impulsos angulares totales y momentos dipolares magnéticos que estrictamente se cancelan. La suposición es suficientemente buena como para predecir la magnitud correcta del impulso angular total del núcleo, ya que esta cantidad está cuantizada. Si ocasionalmente las parejas poseen un impulso angular total diferente de cero, entonces en ese momento el nucleón impar *debe* tener exactamente el impulso angular correcto para compensar y mantener constante la magnitud del impulso angular total del núcleo. Este tipo de compensación no puede ocurrir en el caso de los momentos dipolares magnéticos ya que los factores g, que relacionan las magnitudes de los momentos dipolares magnéticos con las magnitudes de los impulsos angulares, cambian a medida que cambian los acoplamientos de los impulsos angulares (ver la sección 10-6). Como el momento magnético dipolar nuclear no tiene su *magnitud* cuantizada, no existe refuerzo para dicha compensación.

15.10 Modelo colectivo

El modelo de capas se basa en la idea de que las partes constituyentes de un núcleo se mueven independientemente. El modelo de la gota implica justamente lo contrario, ya que una gota de un líquido incomprensible presentaría el movimiento de cualquiera de sus partes constituyentes correlacionado con el movimiento de todas las partes vecinas. El choque entre estas ideas destaca el hecho de que un *modelo* proporciona una descripción de sólo un *conjunto limitado* de

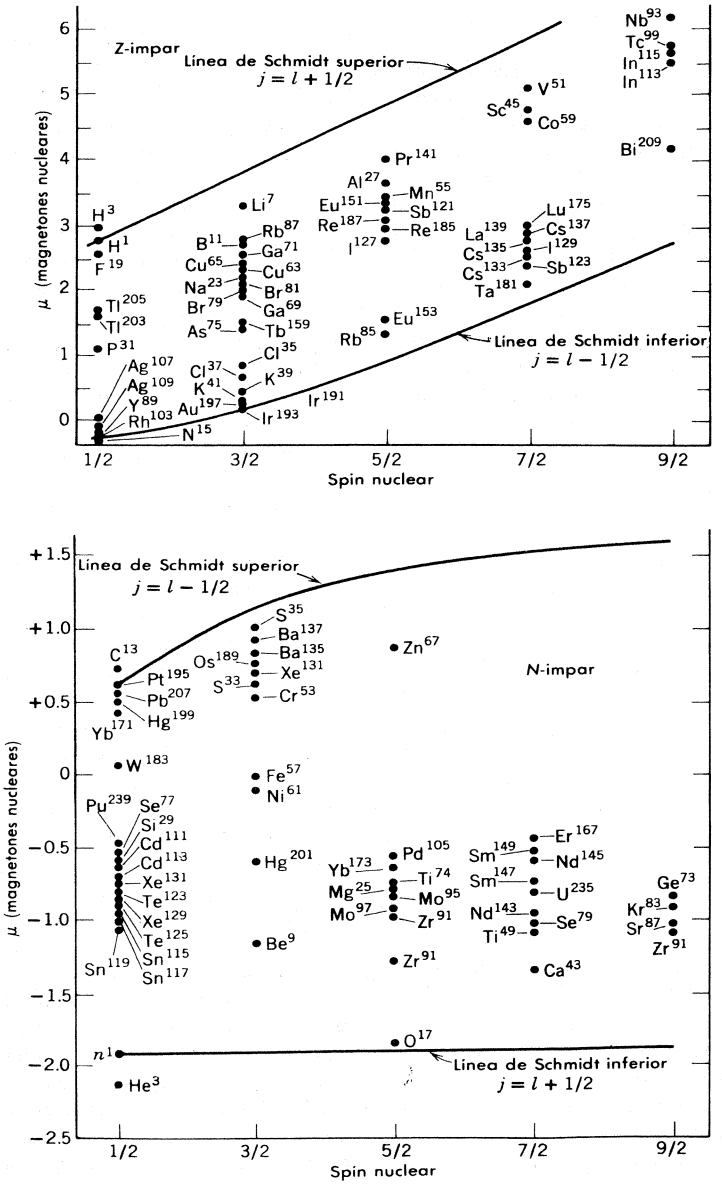


FIGURA 15-19

Arriba: Medidas de momentos dipolares magnéticos para núcleos con N par y Z impar, y las predicciones del modelo de capas. La línea superior es la predicción correspondiente a suponer que los impulsos angulares orbital y de spin son esencialmente paralelos y la línea inferior es la predicción correspondiente a suponerlos esencialmente antiparalelos. *Abajo:* Lo mismo, pero para N impar y Z par. Una vez más la línea superior corresponde a la suposición "paralela" y la línea inferior para la suposición "antiparalela".

fenómenos, sin tomar en cuenta la existencia de modelos contrarios utilizados para la descripción de otros conjuntos. Una *teoría*, como la relatividad o la teoría cuántica, proporciona una descripción de un *conjunto muy grande* de fenómenos. En las líneas fronterizas entre su propio conjunto de fenómenos y otros conjuntos de fenómenos, una teoría se funde, sin conflictos con las otras teorías utilizadas para la descripción de los otros conjuntos.

A medida que la física nuclear evoluciona, se realizan intentos para eliminar las discrepancias entre los diversos modelos y unificarlos en modelos más completos. El ejemplo más importante y de mejor éxito es el *modelo colectivo del núcleo*, que combina ciertas características del modelo de capas y del de la gota. Se debe en parte al trabajo de Aage Bohr, cuyo padre desarrolló el modelo atómico de Bohr. El modelo colectivo supone que los nucleones en las subcapas no llenas de un núcleo, se mueven independientemente en un potencial nuclear neto producido por la *coraza* de subcapas llenas, como en el modelo de capas. Sin embargo, el potencial neto debido a la coraza no es el estático potencial esféricamente simétrico $V(r)$ utilizado en el modelo de capas, sino que se trata de un potencial capaz de sufrir deformaciones. Estas deformaciones representan el movimiento correlacionado, o colectivo de los nucleones en la coraza del núcleo asociado con el modelo de la gota.

Como en el caso del modelo de capas, los nucleones llenan los niveles de energía del potencial, los cuales se desdoblan por la misma interacción spin-órbita y conducen a las mismas predicciones de los números mágicos, del spin nuclear y de la paridad nuclear. Considérese un núcleo con uno o más nucleones que un número mágico de ellos. Examinando los niveles de energía del modelo de capas de la figura 15-18, demostrará que el nucleón extra tendrá un impulso angular orbital relativamente grande. Clásicamente se moverá en una órbita de radio relativamente grande, cercana a la superficie de la coraza de subcapas completamente llenas. Debido a la interacción nuclear atractiva entre el nucleón extra y los nucleones de la coraza, éstas se distorsionan. Aparecen prominencias que circulan en torno a la superficie de la coraza, siguiendo el movimiento del nucleón extra. Este efecto es muy parecido al de las mareas en la superficie de la tierra, que siguen el movimiento de la luna y que resultan de la interacción gravitacional atractiva. Si existen dos nucleones extras de la misma especie, clásicamente se moverá en direcciones opuestas en torno a la superficie de la coraza en órbitas que esencialmente están en el mismo plano. La razón es que la interacción de apareamiento produce un acoplamiento "antiparalelo" de sus impulsos angulares. Esto aumenta la distorsión de la coraza. Físicamente esta distorsión afecta el movimiento de los nucleones extras. Matemáticamente, lo anterior se maneja distorsionando el potencial neto en el que se mueven estos nucleones. Un resultado es una complicación considerable de la tarea, necesaria, de resolver la ecuación de Schrödinger para el potencial. Otro resultado, es una extensión considerable del conjunto de fenómenos que se pueden describir con precisión mediante el modelo.

En el modelo colectivo, por ejemplo, parte del impulso angular total del núcleo se manifiesta en la forma de impulso angular orbital "por la marejada" que circula en torno a la superficie de la coraza. Una deformación en movimiento, compuesta *parcialmente* de protones constituye una corriente que produce un momento dipolar magnético proporcional a su impulso angular. Esto también es cierto en el caso del movimiento de un solo nucleón que de acuerdo con el modelo de capas es totalmente responsable del momento dipolar magnético nuclear, pero las constantes de proporcionalidad difieren. La deformación en movimiento produce un momento dipolar magnético menor que un protón en movimiento pero más que un neutrón en movimiento, en relación con el impulso angular que lleva. Estos cambios son exactamente los que se requieren para eliminar las discrepancias entre los momentos dipolares magnéticos nucleares medidos y las predicciones del modelo de capas, como lo muestran las líneas de Schmidt en la figura 15-19.

El estudiante podrá observar una analogía entre el comportamiento de dos electrones que se mueven siempre en direcciones opuestas con spin antiparalelos en un par de Cooper de un superconductor y dos neutrones o dos protones moviéndose en direcciones opuestas en una subcapa incompleta de un núcleo con spin que, debido a la interacción de apareamiento nuclear, también son antiparalelas. Otra analogía es

que en ambos casos el comportamiento de un par de partículas interactuantes influye, y es influenciada por el comportamiento de otras partículas en el sistema, que se mueven colectivamente. Se encuentran también analogías entre los procedimientos matemáticos utilizados en los cálculos BCS de superconductividad y los cálculos del modelo colectivo nuclear.

Una propiedad nuclear que se explica bastante bien en términos del modelo colectivo es el momento cuadrupolar eléctrico q. En la sección 15-2, se explicaron brevemente las medidas de desdoblamiento hiperfino que proporciona q y también se afirmó que q es una medida de la desviación de la distribución de carga nuclear de la simetría esférica, como se observa en mediciones tales como el desdoblamiento hiperfino que son sensibles a los promedios en el tiempo de esta desviación. La definición exacta del momento cuadrupolar eléctrico es

$$q = \int \rho[3z^2 - (x^2 + y^2 + z^2)]\, d\tau \tag{15-35}$$

donde ρ es el promedio temporal de la densidad de carga nuclear en unidades de cargas protónicas y donde la integral tridimensional está tomada sobre todo el volumen nuclear con d como elemento de volumen. Nótese que q es igual a Z, el número de protones en el núcleo, multiplicada por el promedio sobre ρ de la diferencia entre tres veces el cuadrado de la coordenada z y la suma de los cuadrados de todas las coordenadas. Es decir,

$$q = Z[3\overline{z^2} - (\overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2})] \tag{15-36}$$

Entonces, es evidente que $q = 0$ si el promedio temporal de la densidad de carga nuclear ρ es esféricamente simétrica ya que en ese caso $\overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2}$. Si ρ no es esféricamente simétrica, al menos deberá tener una simetría axil a lo largo de la dirección respecto a la cual el impulso angular total del núcleo precede aleatoriamente al transcurrir el tiempo. En los casos típicos, la densidad de carga promediada en el tiempo es un elipsoide con un eje de simetría en esa dirección. Para (15-35) y (15-36), el eje de simetría se toma como el eje z. La segunda de estas ecuaciones demuestra inmediatamente que $q > 0$ si ρ está elongada en la dirección z de modo que $\overline{z^2} > \overline{x^2} = \overline{y^2}$, y que $q < 0$ si ρ se encuentra aplanada en la dirección z de modo que $\overline{z^2} < \overline{x^2} = \overline{y^2}$.

En la figura 15-20 se muestran los valores medidos del momento cuadrupolar eléctrico nuclear promediado en el tiempo, o sea q. Algunas de las características de los datos mostrados en la figura pueden ser entendidos cualitativamente en términos del modelo de capas. Por ejemplo, el modelo predice que $q < 0$ para un núcleo con N par y Z impar, siendo Z igual a un número mágico más uno. La razón es que el núcleo contiene solamente subcapas completamente llenas de protones, que tienen una distribución de carga esféricamente simétrica, más un protón impar que se mueve en una "órbita" cercana al plano perpendicular a su eje de simetría. Por lo tanto, la distribución de carga se encuentra aplanada en la dirección del eje de simetría. Para un núcleo con N par y Z impar, siendo Z igual a un número mágico menos uno, el modelo de capas predice correctamente $q > 0$ ya que este núcleo contendría un agujero de protón (la ausencia de carga) moviéndose en una órbita similar. Los argumentos basados en el modelo de capas se ilustran en la figura 15-21, y son los que hacen posibles las observaciones (1) que q es positiva para un núcleo con N par y Z impar si Z se encuentra en un intervalo ligeramente debajo de un número mágico, (2) que q es cero si Z es un número mágico y (3) que q es negativa si Z se encuentra en un intervalo ligeramente arriba del número mágico. Sin embargo, el modelo de capas no es capaz de producir resultados cuantitativamente correctos para los momentos cuadrupolares eléctricos. Sus predicciones de la magnitud de q son generalmente bajas, y para algunos núcleos entre los números mágicos son más bajas, por factores mayores que diez, que la magnitud observada.

Ejemplo 15.12. Estimar la predicción del modelo de capas para el momento cuadrupolar eléctrico promediado en el tiempo, q, del núcleo $^{51}Sb^{123}$, y compararla con el valor medido que se muestra en la figura 15-20.

De acuerdo con el modelo de capas la distribución de carga de este núcleo se debe a una coraza esféricamente simétrica completamente llena de protones en sus respectivas subcapas, más un sólo protón no apareado en una subcapa $1g_{9/2}$. Como el impulso angular orbital de este protón es grande ($l = 4$), puede concebirse, hasta una buena aproximación como moviéndose en una órbita tipo Bohr de radio aproximadamente igual al radio nuclear r'. (Recuérdese que en la sección 7-8 se encontró que el

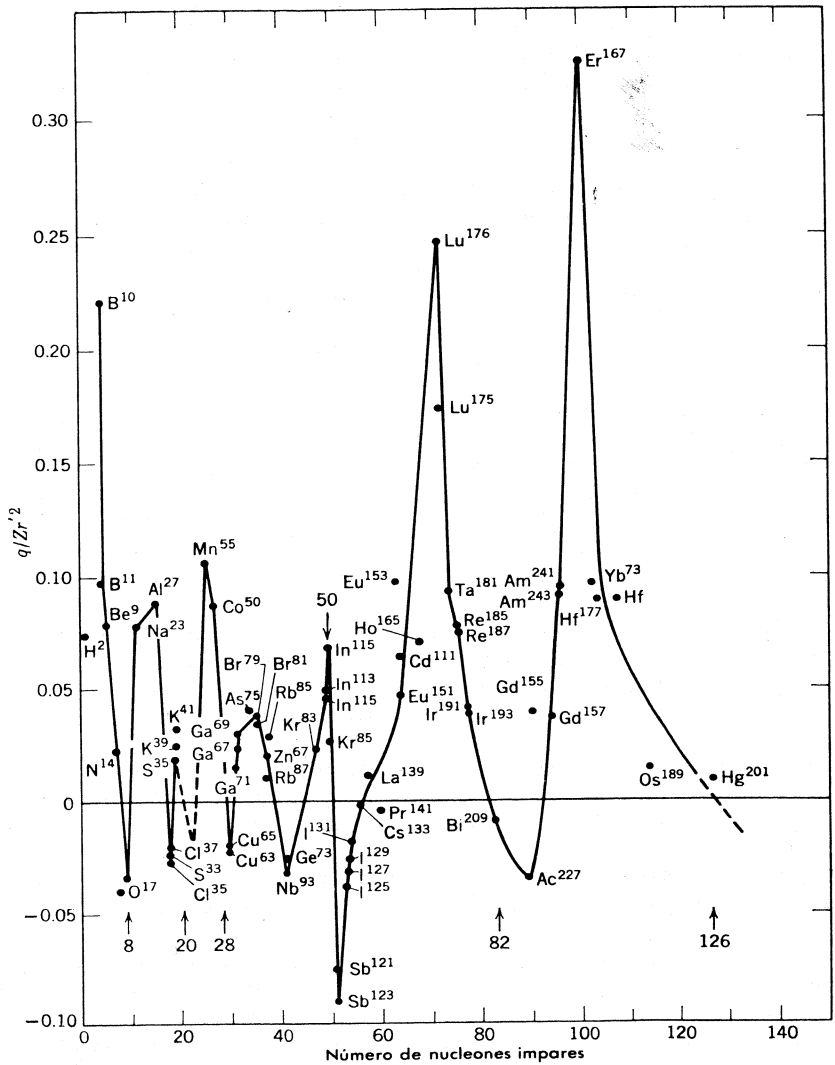


FIGURA 15-20

Momento cuadrupolar eléctrico nuclear q, respecto al eje de simetría dividido entre Zr'^2, para núcleos con A impar. La distancia r' es el promedio del centro de la distribución elipsoidal, de carga $+ Ze$, a la superficie. La cantidad $1 + q/Zr'^2$ es aproximadamente igual al cociente entre las distancias entre el centro y la superficie medidas paralela y perpendicular al eje de simetría.

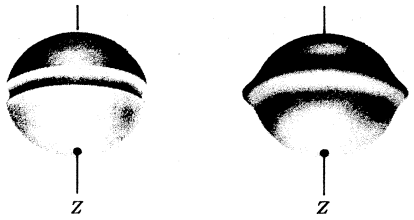


FIGURA 15-21
Izquierda: Ilustración esquemática de un protón no apareado en un núcleo cuya Z es igual a un número mágico más uno. Hasta una aproximación bastante buena, el protón se mueve en una órbita cuyo radio es igual al radio nuclear, su distribución de carga promediada en el tiempo se ve como un anillo. La distribución de carga total contiene un exceso de carga, en relación con la distribución de carga esférica, en un plano perpendicular al eje de simetría (el eje z). Por lo tanto, el núcleo tiene un momento cuadrupolar negativo. *Derecha:* Ilustración de un agujero de protón en un núcleo cuya Z es igual a un número mágico menos uno. Promediando en el tiempo, el agujero conduce a un anillo que contiene una deficiencia de carga en un plano perpendicular al eje de simetría. El momento cuadrupolar eléctrico es positivo porque la distribución de carga posee un exceso de carga, en relación con una distribución esférica, en la dirección del eje de simetría (el eje z).

movimiento orbital tiende al límite clásico cuando l se hace grande). Por lo tanto, un promedio en el tiempo de la distribución de carga nuclear puede verse como lo que se muestra en el lado izquierdo de la figura 15-21. La coraza esférica no contribuye al momento cuadrupolar eléctrico nuclear q. De esta manera, si se toma el eje de simetría perpendicular a la órbita como el eje z, se obtiene

$$q = \int \rho[3z^2 - (x^2 + y^2 + z^2)]\, d\tau$$

donde ρ es aproximadamente la densidad de carga para un anillo uniformemente cargado de radio r', en un plano perpendicular a z. Esta ρ es cero excepto cuando $x^2 + y^2 = r'^2$ y $z = 0$. Por lo tanto,

$$q \simeq \int \rho[-r'^2]\, d\tau = -r'^2 \int \rho\, d\tau$$

La integral de ρ da uno ya que el anillo contiene la carga de un protón y ρ se mide en unidades protónicas de carga. Por lo tanto, el resultado que se obtiene como estimación de las predicciones de q, partiendo del modelo de capas, para $^{51}Sb^{123}$ es

$$q \simeq -r'^2$$

La figura 15-20 muestra que el valor medido de q para este núcleo es tal que

$$\frac{q}{Zr'^2} \simeq -0.09$$

o bien,

$$q \simeq -0.09Zr'^2 \simeq -0.09 \times 51r'^2 \simeq -5r'^2$$

La magnitud de la predicción del modelo de capas es muy baja, comparada con las medidas, por un factor de aproximadamente 5. ◀

Otra predicción del modelo de capas es que el valor del momento cuadrupolar eléctrico para núcleos con A impar depende significativamente de si tienen N impar y Z par, o bien, N par y Z impar. La razón es que simplemente los nucleones no apareados son neutrones sin carga en el primer caso y protones cargados en el segundo caso. Sin embargo, la figura 15-20 muestra que el

valor de q para núcleos con A impar depende solamente del número de nucleones no apareados, independientemente de que dichos nucleones estén o nó cargados.

El modelo colectivo explica todas las características de los momentos cuadrupolares eléctricos medidos y que son predichos incorrectamente por el modelo de capas. Conduce a valores de q suficientemente grandes porque la coraza puede deformarse de modo que las cargas de muchos protones contribuyan al momento cuadrupolar eléctrico total. Para los núcleos que se encuentran entre números mágicos, las deformaciones de la coraza se vuelven bastante grandes y, por lo tanto, los momentos cuadrupolares eléctricos se vuelven también bastante grandes. Como las deformaciones pueden ser debidas a nucleones extras de cualquiera de las especies, el modelo colectivo explica por qué el valor observado de q no depende significativamente de si los nucleones no apareados son neutrones o protones.

Además de las rotaciones colectivas de la coraza nuclear que se han venido considerando existen también vibraciones colectivas. El ejemplo más espectacular, ciertamente, es la fisión nuclear. Esto será discutido en el capítulo siguiente.

15.11 Resumen

La tabla 15-3 sintetiza brevemente este capítulo enlistando los modelos nucleares que se han tratado y algunas de sus características más significativas. Se ha visto que cada modelo puede proporcionar explicaciones satisfactorias para ciertas propiedades de los núcleos en sus estados base (sin embargo, ningún modelo por sí sólo puede explicar todas las propiedades). En el siguiente capítulo, se verá que estos modelos pueden proporcionar explicaciones de las propiedades del decaimiento nuclear y de las reacciones nucleares. En ese capítulo, se presentará también otro importante modelo nuclear que no aparece en la tabla 15-3. Este es el *modelo óptico*, que es una generalización del modelo de capas que describe el comportamiento de un nucleón no ligado moviéndose por todo el núcleo.

TABLA 15-3. Modelos nucleares y las propiedades del estado base de los núcleos.

Nombre	Suposiciones	Teoría utilizada	Propiedades predichas
Modelo de la gota	Los núcleos poseen densidades de masa similares y energías de enlace casi proporcionales a sus masas como gotas cargadas	Clásica (los términos de asimetría y apareamiento se introducen sin justificación)	Masas y energías de enlace promedio precisas a través de la fórmula semiempírica de la masa
Modelo del gas de Fermi	Los nucleones se mueven independientemente en el potencial nuclear neto	Estadística cuántica del gas de nucleones de Fermi	Profundidad del potencial nuclear neto. Término de asimetría
Modelo de capas	Los nucleones se mueven independientemente en el potencial nuclear neto, con un fuerte acoplamiento spin-órbita invertido	Solución de la ecuación de Schrödinger para el potencial nuclear neto	Números mágicos, spin nucleares. Paridades nucleares. Término de apareamiento
Modelo colectivo	El potencial nuclear neto sufre deformaciones	La ecuación de Schrödinger se resuelve para un potencial nuclear neto no esférico	Momentos dipolares magnéticos. Momentos cuadrupolares eléctricos

PREGUNTAS

1. ¿Hubo alguna etapa en el desarrollo de la física atómica en la que los modelos representaran un papel comparable al que tienen hoy en la física nuclear? ¿Se utilizan modelos actualmente en la física atómica?

2. En aquellas regiones del universo donde la energía térmica es $kT \sim 10^6$ eV, ¿los procesos atómicos son más aparentes que los nucleares? ¿Qué pasaría en aquellas regiones donde $kT \sim 10^{-6}$ eV?

3. Todos los núcleos poseen un momento monopolar eléctrico (que es una medida de su carga total). Algunos núcleos poseen un momento cuadrupolar eléctrico (que mide la desviación respecto a la forma esférica de su distribución de carga). Ningún núcleo posee un momento dipolar eléctrico (que mediría una desviación del centro de su distribución de carga respecto al centro de su distribución de masa). ¿Por qué no es de esperarse que existan momentos dipolares eléctricos nucleares?

4. Los núcleos poseen momentos dipolares magnéticos. ¿Por qué no poseen momentos monopolares magnéticos? ¿Y momentos cuadrupolares magnéticos?

5. Si un electrón con una energía cinética de 100keV pasa a través de un átomo típico podría ser dispersado con un ángulo bastante grande por una colisión con un electrón atómico. Si su energía cinética es 100 MeV podrá ser dispersada un ángulo grande únicamente si la colisión es con el núcleo. ¿Por qué?

6. ¿Por qué no se definen la unidad de masa en términos de la masa del átomo de hidrógeno? (Sugerencia: utilizar la tabla 15-1 para realizar una estimación rápida de la masa de $^{92}U^{238}$ si la masa del $^{1}H^{1}$ es $1.000000u$).

7. Como las reacciones atómicas y moleculares implican energías de enlace, ¿por qué los químicos del siglo XIX no observaron deficiencias de masa descubriendo, por lo tanto, la teoría de la relatividad?

8. En muchos libros de texto de mecánica hay problemas en los que se consideran colisiones con valor $-Q$ igual a cero entre partículas clásicas ideales. ¿El valor de Q sería exactamente cero si las colisiones fueran entre partículas clásicas reales (como bolas de billar reales)? ¿Cuál sería el signo del valor Q?

9. ¿Por qué los núcleos más estables se encuentran en la región cercana a $A \simeq 60$? ¿Por qué no todos núcleos tienen $A \simeq 60$?

10. La fórmula semiempírica de la masa contiene cinco parámetros y predice con bastante precisión más de 500 masas. ¿Cómo se compara su relación de predicciones a parámetros con otras fórmulas empíricas de física o ingeniería?

11. ¿Por qué la contribución del término de apareamiento a la energía liberada cuando el $^{92}U^{238}$, captura un neutrón es negativa, y la misma contribución es positiva en el caso de $^{92}U^{235}$? ¿Cuáles son las consecuencias prácticas de esta situación?

12. ¿Por qué los números mágicos atómicos no son iguales a los números mágicos nucleares?

13. Explicar por qué no puede haber colisiones entre un nucleón típico y otro, en un núcleo en su estado base. Si un nucleón de mayor energía, en un haz de ciclotrón, por ejemplo, penetra un núcleo en su estado base, ¿puede chocar con un nucleón en el núcleo?

14. ¿Cuál ley fundamental de la física es la principal causa de la existencia de números mágicos nucleares?

15. ¿Existe alguna relación entre la dependencia con l de los desdoblamientos spin-órbita de los niveles nucleares y la regla del intervalo de Landé para el desdoblamiento spin-órbita de los niveles de energía atómicos?

16. ¿Por qué la mayoría de los núcleos están sujetos al acoplamiento *JJ*, mientras que la mayoría de los átomos están sujetos al acoplamiento *LS*?

17. Utilizar los argumentos asociados con la figura 9-4 para explicar por qué existe una tendencia de que los impulsos angulares de spin intrínseco de un par de nucleones idénticos sean esencialmente antiparalelos porque esto minimiza su serparación promedio. Después, modificar los argumentos ilustrados en la figura 10-2 para explicar por qué la separación promedio del par se minimiza si sus impulsos angulares orbitales son también esencialmente antiparalelos. ¿Estos argumentos explican por qué la interacción de apareamiento tiende a que los impulsos angulares totales del par sean esencialmente antiparalelos?

18. Si un factor en una eigenfunción nuclear consiste de un producto de un número par de eigenfunciones para nucleones en una subcapa particular, ¿por qué la paridad del factor será par, independientemente de si las paridades de las eigenfunciones nucleónicas sean todas pares o todas impares? ¿Cómo puede lo anterior conducir a la regla para predecir las paridades de las eigenfunciones nucleares con A impar?

19. ¿Cómo podría utilizarse la información sobre momentos dipolares magnéticos de la figura 15-19 para identificar el número cuántico del impulso angular orbital l de muchos núcleos en términos de los valores medidos de su número cuántico de impulso angular total j?

20. Si la "marejada" que circula en torno a la coraza nuclear en el modelo colectivo estuviese compuesta totalmente de protones en lugar de estar compuesta parcialmente de protones y parcialmente de neutrones, ¿cuál sería el efecto sobre los momentos dipolares magnéticos predichos por el modelo?

21. ¿Cuál es la distribución más simple de cargas puntuales que posee un momento cuadrupolar eléctrico?

22. ¿Por qué al modelo nuclear de capas se le llama modelo, mientras que a la teoría atómica de Hartree, que es comparable, se le llama teoría? Generalmente hablando, ¿cuál es la diferencia entre un modelo y una teoría?

PROBLEMAS

1. El análisis del espectro óptico de un átomo muestra que existen cuatro niveles de energía por desdoblamiento hiperfino en cierto multiplete. El análisis también muestra que el valor del número cuántico del impulso angular electrónico total para ese multiplete es $j = 2$. Determinar el valor del número cuántico del impulso angular nuclear, o spin nuclear i, para el núcleo de un átomo.

2. El carácter de la simetría y el spin nuclear del núcleo de boro con $Z = 5$ y $A = 10$ son: $i = 3$, simétrico. (a) Demostrar que la masa, carga, spin nuclear y carácter de simetría concuerdan con la suposición de que el núcleo contiene Z protones y A-Z neutrones. (b) ¿Cuál de estas propiedades no concuerda con la suposición de que el núcleo contiene A protones y A-Z electrones?

3. (a) Calcular, en MeV, la energía de atracción gravitacional entre dos protones esféricamente simétricos cuya separación, centro a centro, es 2F. (b) Hacer lo mismo para la energía de repulsión de Coulomb a esa separación. (c) Comparar los resultados con la energía de atracción nuclear que es aproximadamente —10 MeV a esa separación.

4. Un blanco que contiene núcleos de ^{79}Au dispersa electrones con energía cinética de 1000 MeV. (a) Utilizar los datos de la figura 15-6 para encontrar el radio al cual la densidad de carga nuclear es la mitad de su valor en el interior. (b) Después, utilizar este radio para predecir aproximadamente la separación angular entre mínimos adyacentes del patrón de difracción que se observa por la dispersión.

5. Utilizar la ecuación empírica que representa las densidades de carga nuclear medidas, (15-5), y el parámetro b que se cita en (15-7), para determinar la distancia a la cual las densidades de carga nuclear caen de 90% a 10% de sus valores internos.

6. Derivar (15-16), que relacionan el valor Q de una reacción nuclear con las cantidades dinámicas implicadas en la reacción. (Sugerencia: escribir las ecuaciones de conservación de las componentes del impulso lineal en las direcciones paralela y perpendicular a la dirección de la partícula incidente. Después, eliminar el ángulo entre la dirección del núcleo residual y la dirección de la partícula incidente de estas ecuaciones).

7. (a) Utilizar (15-16) para calcular la energía de los protones emitidos en la dirección de incidencia del haz de partículas α de 7.70 MeV en la reacción de Rutherford de (15-11). El valor Q de la reacción es —1.18 MeV. (b) Comparar estos resultados con los del ejemplo 15-4.

8. Como la reacción $^1H^2 + {}^1H^3 \rightarrow {}^2He^4 + {}^0n^1$ tiene un valor Q positivo grande, frecuentemente se utiliza para obtener neutrones de alta energía, $^0n^1$, a partir de un generador electrostático de baja energía que acelera un haz de deuterones, $^1H^2$, hacia un blanco con tritio, $^1H^3$. (a) Utilizar la información presentada en la tabla 15-1 para calcular el valor Q de la reacción. (b) Utilizar (15-16) para calcular la energía de los neutrones emitidos en la reacción en la misma dirección que el haz incidente de deuterones, si la energía de los deuterones es 0.500 MeV.

9. Utilizar las masas enlistadas en la tabla 15-1 para verificar que la energía de enlace por nucleón del $^6C^{12}$ tiene el valor que aparece en esa tabla.

10. (a) Utilizar la información presentada en la tabla 15-1 para evaluar la energía liberada en la fusión de dos núcleos $^1H^2$ para formar un núcleo $^2He^4$ en MeV. (b) Calcular también en MeV la altura de la barrera de Coulomb de repulsión que debe ser vencida antes de que exista una probabilidad apreciable de que dos núcleos puedan aproximarse lo suficiente para que la fusión tenga lugar. Considerar al núcleo $^1H^2$ como una esfera de carga uniforme de radio 1.5F, y calcular la energía de repulsión de Coulomb cuando apenas se tocan.

11. (a) La energía de Coulomb de una esfera uniformemente cargada de radio r', es decir, la energía necesaria para ensamblar la carga es

$$V = \frac{3}{5}\frac{Z^2e^2}{4\pi\epsilon_0 r'}$$

Tómese $r' = 1.1A^{1/3}$ F, que es consistente con las medidas de dispersión electrónica y demostrar que V asume la forma del término de Coulomb de la fórmula semiempírica de la masa. (b) Calcular, en unidades de masa, el coeficiente de $Z^2/A^{1/3}$ en la expresión que se tiene para V y comparar con el valor empírico del coeficiente a_3 dado en (15-31).

12. Los núcleos $^5B^{11}$ y $^6C^{11}$ se consideran como un par de *núcleos espejo* puesto que tienen el mismo número de nucleones y el número de protones en uno de ellos es igual al número de neutrones en el otro. Si las fuerzas nucleares son independientes de la carga, sus energías de enlace total deberán diferir únicamente en que la energía de Coulomb es mayor en $^6C^{11}$. La masa atómica del $^5B^{11}$ es 11.009305u, y la masa atómica del $^6C^{11}$ es 11.011432u. (a) Calcular la diferencia en sus energías de enlace totales. (b) Suponer que ambos núcleos son esferas cargadas uniformemente de igual radio r', y utilizar la expresión para la energía de Coulomb dada en el problema 11 para encontrar el valor de r' que conduce a una diferencia en energía de Coulomb que concuerde con la diferencia en energías de enlace. (c) Comparar este radio de la distribución de carga con la dependencia radial de la densidad de carga para el núcleo semejante $^6C^{12}$ que se muestra en la figura 15-6.

13. (a) Calcular los términos de la fórmula semiempírica de la masa para $^{26}Fe^{56}$. (b) Convertirlos a sus equivalentes en MeV, dividido entre A y compararlos después con la figura 15-12. (c) Utilizar dichos términos para predecir la masa atómica. (d) Calcular la energía de enlace promedio por nucleón y compararla con la figura 15-10.

14. De acuerdo con el *modelo de partículas-α del núcleo*, el $^6C^{12}$ consiste de tres partículas α es decir, núcleos $^2He^4$ y el $^8O^{16}$ consiste de cuatro partículas α. (a) Utilizar la tabla 15-1 para calcular la

diferencia entre las energías de enlace total del $^{6}C^{12}$ y la correspondiente a tres partículas α. (b) Calcular la diferencia entre la energía de enlace total del $^{8}O^{16}$ y las energías de enlace de cuatro partículas α. (c) Dibujar diagramas esquemáticos del $^{6}C^{12}$ y del $^{8}O^{16}$ de acuerdo con el modelo de partículas α y utilizarlos para demostrar que puede haber tres "enlaces" conectando las partículas alfa en el $^{6}C^{12}$ mientras que puede haber seis enlaces conectando las partículas α en el ^{8}O. La naturaleza exacta de un enlace no fué especificada en el modelo, pero se pensó que sería análogas a las ligaduras o enlaces moleculares. (d) Utilizar los resultados de las partes (a) y (b) para demostrar que las energías de enlace total del $^{6}C^{12}$ y del $^{8}O^{16}$ se podrían explicar diciendo que cada enlace posible contribuye con una energía de enlace de algo más de 2 MeV. El modelo de partículas α no ha sido muy tomado en cuenta ya que es poco lo que puede hacerse con él aparte de lo que se ha hecho en este problema.

15. Utilizar el acróstico explicado en la sección 15-8 para construir el diagrama que proporciona el ordenamiento y espaciamiento aproximados de los niveles de energía que llenan los nucleones en el modelo de capas *después* de haber terminado hacer una comparación con la figura 15-18.

16. Utilizar el argumento del principio de exclusión del ejemplo 15-10 para predecir a partir del diagrama de la figura 15-18, para el modelo de capas, los spin nucleares de: $^{20}Ca^{40}$, $^{20}Ca^{39}$, $^{20}Ca^{41}$.

17. (a) Utilizar la existencia de la interacción de apareamiento para predecir, a partir del diagrama para el modelo de capas de la figura 15-18, los spin nucleares y las paridades de $^{6}C^{11}$, $^{20}Ca^{44}$, $^{28}Ni^{61}$, $^{32}Ge^{73}$. Justificar brevemente cada predicción. (b) Los spin y las paridades que se han observado son: (3/2, impar), (0, par), (3/2, impar), (9/2, par). Dar una explicación de cualquier discrepancia que se encuentre.

18. (a) A partir del diagrama de la figura 15-18 para el modelo de capas, predecir los valores posibles de los spin nucleares y sus paridades, de los siguientes núcleos con N impar y Z impar: $^{5}B^{10}$, $^{19}K^{40}$, $^{23}V^{50}$. (b) Los spin y paridades observadas son: (3, par) (4, impar), (6, impar). ¿Podría existir alguna tendencia preferencial en el acoplamiento de los impulsos angulares del protón y del neutrón no apareados?

19. El spin nuclear medido del $^{23}V^{51}$ es 7/2. Como este es un núcleo con N par y Z impar, el spin nuclear se debe al protón no apareado que tiene un número cuántico de impulso angular total $j = 7/2$. Como existen dos posibles relaciones entre j y el número cuántico de impulso angular orbital l para ese protón, a saber, $j = l - 1/2$ y $j = l + 1/2$, el valor de l puede ser 3 o 4. (a) Utilizar el valor medido del momento dipolar magnético y su relación con las líneas de Schmidt, que se muestran en la figura 15-19, para predecir el valor más probable de l. (b) Utilizar el diagrama de la figura 15-18 del modelo de capas para predecir el valor de l y compararlo con (a).

20. (a) Utilizar el valor medido del momento cuadrupolar eléctrico del $^{73}Ta^{181}$, presentado en la figura 15-20 para calcular aproximadamente la razón entre las distancias del centro a la superficie de su distribución de carga elipsoidal, medida paralela a y perpendicular con su eje de simetría. (b) Utilizar el radio de la distribución de carga a obtenido por dispersión de electrones de (15-6), para calcular aproximadamente el promedio de estas distancias. (c) De las respuestas a (a) y (b) calcular aproximadamente estas distancias que son los semiejes mayor y menor de la distribución de carga elipsoidal. (d) Hacer un diagrama, a escala, de la distribución de carga.

16

Decaimiento y reacciones nucleares

16.1 Introducción 635

Información proporcionada por el decaimiento y las reacciones.

16.2 Decaimiento alfa 635

Relación entre el decaimiento y las reacciones; radiactividad, núcleos precursores y descendientes; energía de decaimiento y modelos nucleares; penetración de barrera; razón de decaimiento; decaimiento exponencial; tiempo de vida; vida media; equilibrio en las series de decaimiento; series radioactivas; fisión espontánea; elementos superpesados.

16.3 Decaimiento beta 642

Su presencia en series radioactivas; decaimientos energéticos para la emisión del positrón; fraccionamiento de la energía; neutrinos, espectros de impulso; elementos de matriz; interacción en el decaimiento β y constante de acoplamiento; valor FT; reglas de selección; decaimientos prohibidos.

16.4 La interacción del decaimiento beta 653

Evaluación de la constante de acoplamiento; comparación de la intensidad con otras interacciones; intervalo; experimento de Reines-Cowan, experimento de Wu; no conservación de la paridad; helicidad.

16.5 Decaimiento gama 660

Técnicas experimentales; comparación con la radiación atómica; radiación eléctrica y magnética; multipolaridad; modelo de capas; rapidez o razones de transición; reglas de selección y su origen; conversión interna; tiempos de vida y anchuras.

16.6 El efecto Mössbauer 666

Explicación; aplicación.

16.7 Reacciones nucleares **669**

Leyes de conservación y sus aplicaciones; procesos que ocurren en las reacciones; potenciales de dispersión de Coulomb y nuclear; modelo óptico; resonancias por tamaño y estados de partículas simples; interacciones directas; reacciones con núcleos compuestos; resonancias con núcleos compuestos y estados de muchas partículas; fórmula de Breit-Wigner.

16.8 Estados excitados de los núcleos **679**

Visión general; estados bajos en el modelo de capas; estados rotacionales; estados vibracionales; estados de núcleos espejo.

16.9 Fisión y reactores **683**

Reacciones en cadena; bombas y reactores; fisiones energéticas; fisión espontánea e inducida; neutrones en la fisión; moderadores; barras de control; reactores autorregenerables.

16.10 Fusión y origen de los elementos **688**

Fusión térmica; reactores de fusión; procesos big-bang; formación estelar; ciclo protón-protón; ciclo del carbono; formación de elementos.

Preguntas **693**

Problemas **695**

16

Decaimiento y reacciones nucleares

16.1 Introducción

En el capítulo anterior se utilizaron las propiedades de los estados base de los núcleos estables para introducir los más importantes modelos nucleares. En este capítulo se utilizaron estos modelos para considerar el decaimiento de los núcleos inestables y también para considerar las reacciones nucleares en las que intervienen tanto núcleos estables como inestables. Estas consideraciones tratarán estados excitados de los núcleos así como sus estados base.

El decaimiento nuclear se divide en tres categorías. Uno es el decaimiento α, la emisión espontánea de una partícula α por un núcleo de número atómico grande. Se verá que este proceso, o el proceso íntimamente relacionado de la fisión espontánea, es la causa de imponer un límite superior a los números atómicos de los elementos químicos que ocurren en la naturaleza. Un segundo tipo de decaimiento nuclear es el decaimiento β, emisión o absorción espontánea de un electrón o positrón por un núcleo. Este es particularmente interesante porque proporciona información acerca de la interacción del decaimiento β, que es una de las cuatro interacciones o fuerzas fundamentales de la naturaleza. Un tercer tipo de decaimiento nuclear es el decaimiento γ, emisión espontánea de fotones de alta energía, cuando un núcleo realiza una transición de un estado excitado a su estado base. Se encontrará que el decaimiento γ proporciona información detallada sobre los estados excitados de los núcleos y que puede utilizarse para mejorar los modelos nucleares. También se encontrará que el decaimiento γ se utiliza en el efecto Mössbauer para hacer mediciones de la energía con altísima resolución en muchos campos diferentes a la física.

Las reacciones nucleares nos proporcionarán información adicional acerca de los estados excitados de los núcleos ya que los núcleos residuales en una reacción se forman típicamente en un estado excitado. Además de las reacciones nucleares que se consideraron están aquellos que ocurren en los reactores de fisión nuclear que actualmente se utilizan como fuentes de energía muy económicos. También se considerará que algún día se podrán utilizar para producir energía en la tierra mediante fusión nuclear y que por mucho tiempo han utilizado las estrellas para producir la energía y los elementos químicos de los cuales se compone la naturaleza.

16.2 Decaimiento Alfa

El decaimiento nuclear ocurre tarde o temprano, siempre que un núcleo que contenga cierto número de nucleones se encuentre en un estado de energía que no sea el estado más bajo posible para un sistema con dicho número de nucleones. Invariablemente, el núcleo está en un estado inestable como consecuencia de una reacción nuclear. Pero en algunos casos la reacción

nuclear causante de producir el núcleo inestable ocurrió recientemente en un acelerador de partículas hecho por el hombre, mientras que en otros ocurrió en eventos naturales que sucedieron hace billones de años cuando se formó la parte del universo en que vivimos. A los núcleos inestables que se originaron en eventos naturales se les llama frecuentemente *radiactivos* y al proceso que ocurre en su decaimiento se le llama *decaimiento radiactivo* o *radiactividad*. Una de las razones por las cuales el decaimiento radiactivo es interesante, es que proporciona claves acerca del origen del universo.

Un proceso que es particularmente importante en el decaimiento radiactivo es el decaimiento alfa que comúnmente ocurre en núcleos con número atómico mayor que $Z = 82$. Este consiste en el decaimiento de un *núcleo precursor* inestable en un *núcleo descendiente* mediante la emisión de una *partícula* α, al núcleo de $^2He^4$. El proceso tiene lugar espontáneamente debido a que energéticamente es favorable, siendo mayor la masa del núcleo precursor que la masa del núcleo descendiente más la masa de la partícula alfa. La reducción en masa nuclear en el decaimiento se debe principalmente a una reducción en la energía de Coulomb del núcleo cuando su carga Ze se reduce por la carga $2e$ que tiene la partícula alfa. La energía que queda disponible en el decaimiento es la energía equivalente a la diferencia de masa. Esta energía de decaimiento se la lleva la partícula alfa como energía cinética. Ignorando los equivalentes en masa de las energías de enlace del electrón atómico, *la energía del decaimiento* E se puede escribir en términos de las masas atómicas del núcleo precursor $M_{Z,A}$, del núcleo descendiente $M_{Z-2,A-4}$, y de la partícula α como

$$E = [M_{Z,A} - (M_{Z-2,A-4} + M_{2,4})]c^2 \qquad (16\text{-}1)$$

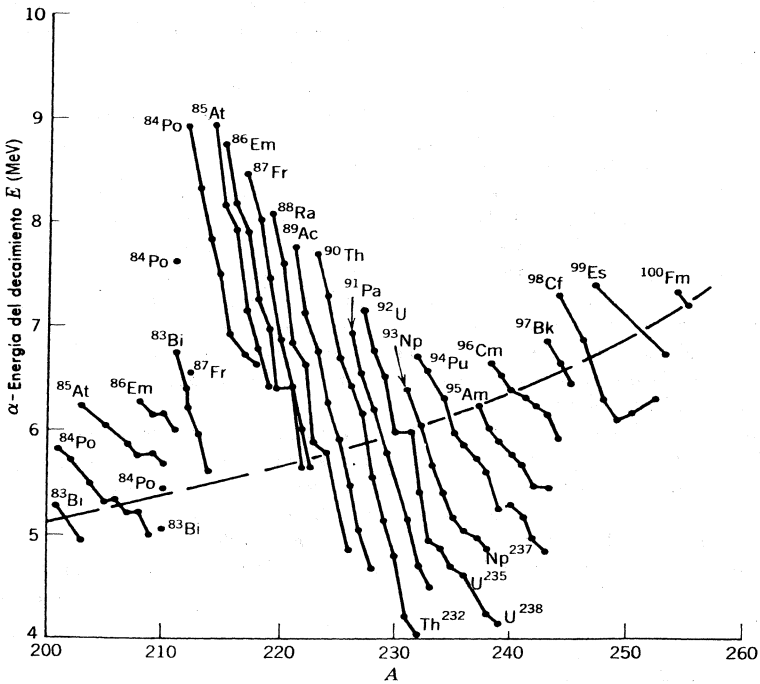


FIGURA 16-1
Energías del decaimiento alfa para núcleos en la región de emisores α. La curva punteada representa la tendencia general encontrada por la fórmula semiempírica de la masa.

La figura 16-1 muestra las energías de decaimiento E para núcleos precursores en el intervalo de emisión α de Z o A. Los datos se obtienen de mediciones directas de la energía cinética de las partículas α al desviarlas en un campo magnético, y/o utilizando (16-1) con las masas medidas. La línea punteada representa la tendencia general en los núcleos precursores de hacerse crecientemente inestables hacia el decaimiento α conforme A se aparta más del valor $A \simeq 60$, donde se maximiza la energía de enlace promedio por nucleón, $\Delta E/A$. También representa las predicciones del modelo de la gota. Superpuesta a la tendencia general existe un pico, aproximadamente de 4 MeV de alto, que aparece en el núcleo precursor $^{84}Po^{212}$. Según el modelo de capas, el pico se explica como debido a la estabilidad particular del núcleo descendiente asociado $^{82}Pb^{208}$. Ya que el descendiente tiene el número mágico $Z = 82$ y el número mágico $N = 126$, está aproximadamente 4 MeV más fuertemente ligado que los núcleos típicos en esta región de A. (La figura 15-13, muestra que en cada número mágico se encuentra alrededor de 2 MeV de energía de enlaces extra). Obsérvese que las energías del decaimiento α van de 8.9 MeV para $^{84}Po^{212}$ hasta 4.1 MeV para $^{90}Th^{232}$.

Las partículas moderadamente energéticas emitidas en el decaimiento alfa de núcleos radioactivos las utilizó Rutherford muy bien y otros en los experimentos de dispersión que condujeron al descubrimiento del núcleo (véase capítulo 4). Se ha continuado en la investigación de la estructura nuclear haciendo uso similar de las partículas α provenientes de fuentes radiactivas hasta la invención de los ciclotrones por Lawrence a finales de los años 30. Los ciclotrones y otros tipos de aceleradores de partículas producen partículas de mayor energía que se pueden utilizar en mediciones más precisas ya que tienen longitudes de onda de Broglie más cortas. También los aceleradores producen haces de partículas más intensos de los que se pueden obtener de las fuentes radiactivas, lo cual hace que las mediciones se realicen con más facilidad.

Ejemplo 16.1. Se emite una partícula α por el núcleo precursor $^{84}Po^{212}$. Estimar el potencial de Coulomb que experimenta ésta en la superficie nuclear y hacer una gráfica aproximada de la suma de los potenciales nucleares y de Coulomb que actúa sobre la partícula α en diversos puntos. Si se aproxima el núcleo descendiente y la partícula α como esferas cargadas uniformemente, la energía potencial repulsiva de Coulomb cuando éstas apenas se tocan será

$$V_0 = +\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r'}$$

donde $+2e$ es la carga de la partícula α, $+Ze$ es la carga del núcleo descendiente, y r' es la suma de la distribución uniforme de carga de la partícula alfa y el núcleo descendiente. Estos radios se pueden estimar utilizando el valor del radio medio de la densidad de carga de las distribuciones de carga reales que se encontraron en las mediciones de dispersión de electrones y que son según (15-6)

$$a = 1.07A^{1/3}\ \text{F}$$

para la suma de los radios se obtiene

$$\begin{aligned} r' &= (4^{1/3} + 208^{1/3})1.07\ \text{F} \\ &= 8.0\ \text{F} \end{aligned}$$

de modo que

$$\begin{aligned} V_0 &= \frac{2 \times 82 \times (1.6 \times 10^{-19}\ \text{coul})^2}{1.1 \times 10^{-10}\ \text{coul}^2/N\text{-m}^2 \times 8.0 \times 10^{-15}\ \text{m}} = 4.8 \times 10^{-12}\ \text{joule} \\ &= 30\ \text{MeV} \end{aligned}$$

La figura 16-2 muestra el potencial total (nuclear más Coulomb) que actúa sobre la partícula α. Conforme ésta se aproxima al núcleo, experimentará el efecto de que el potencial de Coulomb de repulsión aumenta en proporción inversa a la distancia entre los centros de la partícula α y del núcleo y alcanza el valor V_0 cuando esta distancia es igual a r'. En el interior de la superficie experimenta un aumento

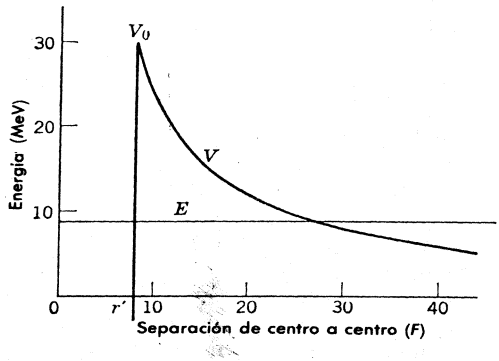


FIGURA 16-2
Representación aproximada del potencial de Coulomb sumado con el potencial nuclear que actúa sobre una partícula α emitida por un núcleo de $^{84}Po^{212}$ y la energía total E de la partícula α

rápido del potencial nuclear atractivo, que domina muy rápidamente. (Por supuesto, que el aumento no es tan rápido como se muestra en la figura). También está indicada la energía $E = 8.9$ MeV del decaimiento α del $^{84}Po^{212}$ que es la energía de la partícula α emitida. Obsérvese que ésta es mucho menor que V_0, que es la altura de la barrera de Coulomb. ◀

Puesto que para cada una de las energías de decaimiento mostradas en la figura 16-1 está por debajo de la altura de las barreras de Coulomb, que son $\sim$ 30 MeV para todos los decaimientos α , la partícula α tiende a quedar atrapada por la barrera en cada decaimiento y solamente puede escapar mediante el proceso mecánico-cuántico de la *penetración de barrera*. Anteriormente se ha tratado detalladamente este proceso, de modo que aquí sólo se recordará al estudiante los resultados, pero él podrá consultar nuevamente la sección 6-6. Cuando menos, es recomendable que examine la figura 6-20 que representa la probabilidad por segundo de que un núcleo emita una partícula α llamada *razón de decaimiento* R, en función de la energía de decaimiento E. La figura muestra que la razón de decaimiento decrece extremadamente rápido conforme decrece la energía de decaimiento y la partícula α penetra más profundamente a través de la barrera de Coulomb.

Considere ahora un sistema que contiene muchos núcleos de la misma especie en un instante inicial. Los núcleos decaen por α (o bien por, β o γ) a la rapidez de decaimiento R. Se calculará el número de núcleos que no han decaído y que están presentes en algún instante subsecuente. Si al tiempo t existen N núcleos que no han decaído, entonces el número de decaimientos en el intervalo de tiempo siguiente dt se puede escribir como dN. Puesto que R es la probabilidad de que un núcleo particular decaiga en un segundo, Rdt es la probabilidad de que decaiga en un segundo, Rdt es la probabilidad que decaiga durante el intervalo de tiempo y $NRdt$ es la probabilidad de que cualesquiera de los núcleos decaiga en este intervalo. Entonces, el promedio de núcleos que decaen es

$$dN = -NR\,dt \tag{16-2}$$

donde el signo menos expresa el hecho de que dN es intrínsecamente negativo ya que N decrece. Rearreglando los términos e integrando se obtiene

$$\frac{dN}{N} = -R\,dt$$

$$\int_{N(0)}^{N(t)} \frac{dN}{N} = -R\int_0^t dt = -Rt$$

$$\ln N(t) - \ln N(0) = \ln \frac{N(t)}{N(0)} = -Rt$$

o

$$\frac{N(t)}{N(0)} = e^{-Rt}$$

así que

$$N(t) = N(0)e^{-Rt} \tag{16-3}$$

En esta expresión *N (0)* es el número de núcleos que no han decaído en el instante inicial y *N(t)* es el número de núcleos que no han decaído al instante subsecuente *t*. Puesto que los cálculos involucran probabilidades, estos resultados sólo son correctos en promedio pero fluctuaciones del promedio son muy pequeñas en el caso típico en el cual el número de núcleos involucrados es muy grande. La figura 16-3 es una gráfica de (16-3), que se le denomina *ley de decaimiento exponencial.*

En la figura 16-3 también se indica el *tiempo de vida T* característico del decaimiento. Este es el tiempo promedio que un núcleo sobrevive antes de decaer. De sus definiciones es obvio que *T* es inversamente proporcional a la razón de decaimiento *R*. De hecho, es fácil mostrar de una integración simple de la ley de decaimiento que

$$T = \frac{1}{R} \tag{16-4}$$

Utilizando esta relación en (16-3), se concluye que en un tiempo de vida el número de núcleos que no decaen decrece por un factor de *e*, como se indica en la figura. Es la vida media $T_{1/2}$, más indicativa ya que es el tiempo requerido para que el número de núcleos que no decaen decrezca por un factor de 2. La relación entre los dos tiempos se obtiene directamente de la ley de decaimiento

$$T_{1/2} = (\ln 2)T = 0.693T \tag{16-5}$$

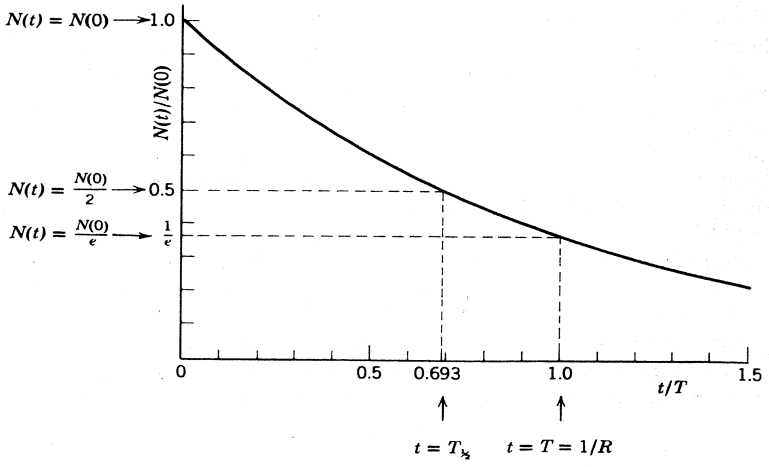


FIGURA 16-3
Ley del decaimiento exponencial para *N(t)*, el número de núcleos que sobreviven al tiempo *t*. También se muestra el tiempo de vida *T* y la vida media $T_{1/2}$. Observe que *N(t)* está expresada en unidades del número original de núcleos *N(O)*, mientras que el tiempo está expresado en unidades del tiempo de vida.

En un sistema más típico existen varios núcleos radiactivos relacionados y que decaen sucesivamente uno en otro por decaimiento α (y/o otros procesos de decaimiento). Por ejemplo $^{92}U^{234}$ decae por α, en $^{90}Th^{230}$, (el que decae por α en $^{88}Ra^{226}$, etc....). Entonces, un sistema que inicialmente esté lleno con $^{92}U^{234}$ contendrá eventualmente una mezcla de todos estos núcleos. Las ecuaciones diferenciales que gobiernan el comportamiento general de una familia como ésta se pueden escribir fácilmente y en ciertos casos se pueden resolver sin mucha dificultad. En los casos más importantes los rasgos significativos de la solución se pueden deducir de los argumentos cualitativos siguientes. Considere una familia en la cual el precursor tiene la rapidez de decaimiento menor, o el tiempo de vida más grande. En la figura 16-4 se muestra esquemáticamente esta situación. En una escala de tiempo comparable con el tiempo de vida del precursor, la población de los precursores decrece exponencialmente. Pero en una escala de tiempo mucho más corta comparable con los tiempos de vida de los descendientes, la población de los padres permanece esencialmente constante y así el número total de decaimiento por segundo en los primeros descendientes parece constante. Puesto que los primeros descendientes decaen rápidamente después de haberse formado, sus poblaciones están gobernadas por el resuministro que proviene del decaimiento de los precursores. Entonces la población de los primeros descendientes permanece constante. Lo mismo es cierto para los segundos descendientes, ya que éstos se han formado a una rapidez constante proveniente del decaimiento de la población constante de los primeros descendientes. De hecho, las poblaciones para todos los descendientes permanecerán constantes mientras que considerando tiempos cortos comparados con el tiempo de vida de los precursores, de modo que la población de los padres permanezca esencialmente constante. (Si se consideran tiempos mayores, el número de descendientes decrece exponencialmente con la misma rapidez que sigue el decaimiento lento de los precursores). Entonces, en la escala de tiempos cortos, se tiene una condición de *equilibrio* que requiere que se satisfaga la relación siguiente

$$N_0R_0 = N_1R_1 = N_2R_2 = \cdots \tag{16-6}$$

Por ejemplo, el primer miembro de la primera igualdad es el número total de precursores que decaen por segundo para formar los primeros descendientes, mientras que el segundo miembro es el número total de los primeros descendientes que decaen por segundo. Si la rapidez total de formación de los primeros descendientes no iguala su rapidez total de decaimiento, su población no permanecería constante. La ecuación 16-6 describe el caso más importante de una familia de decaimiento. Esta se utiliza algunas veces para determinar los valores de R o T a partir de medidas de N y una R conocida.

Ahora se puede entender como se pueden encontrar en la naturaleza con tiempos de vida muy cortos. Por ejemplo, el $^{84}Po^{212}$, con $T \sim 10^{-6}$ seg, se puede extraer de minerales que ocurren de manera natural y que presumiblemente han existido por billones de años. La razón es simplemente que los emisores α de tiempo de vida cortos están en equilibrio con familias de decaimiento con padres de tiempo de vida largo, a esto se le denomina *series radiactivas*. Existen tres de estas series que ocurren de manera natural: la *serie 4n* cuyo precursor es $^{90}Th^{232}$ con $T = 2.01\times10^{10}$ años, la *serie* $4n+2$ cuyo precursor es $^{92}U^{238}$ con $T=6.52\times10^{9}$ años y la serie $4n+3$ cuyo precursor es $^{92}U^{235}$ con $T = 1.02\times10^{9}$ años. Los nombres caracterizan los valores de A para los miembros de la serie. Por ejemplo, el precursor de la serie $4n+3$ tiene $A = a$ cuatro veces un entero mas tres, donde el entero es 58. Puesto que cada decaimiento α reduce

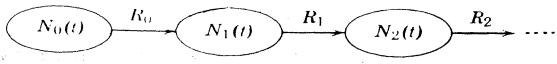


FIGURA 16-4
Representación esquemática de una familia de decaimientos sucesivos.

A en cuatro (y el otro proceso de decaimiento no cambia A), todos los descendientes de esta serie también tendrán A igual a cuatro veces algún entero menor más tres.

Evidentemente, también hay lugar para una serie $4n + 1$. De hecho existe una serie de éstas, cuyo padre es $^{93}Np^{237}$ con tiempo de vida $T = 3.25 \times 10^6$ años. La serie se puede producir artificialmente utilizando una reacción nuclear para hacer al precursor, pero éste no se encuentra en la naturaleza ya que el tiempo de vida del precursor es muy corto comparado con la edad de la tierra, la cual se estima de la evidencia geológica y cosmológica en $\sim 10^{10}$ años (véase el Ejemplo 16-2). Consecuentemente, cualquier núcleo precursor presente inicialmente ya ha decaído.

En conexión con esto, observe que la figura 16-1 muestra que las energías de decaimiento de los padres de las tres series que ocurren naturalmente son particularmente muy bajas. Si fueran menores que 1 MeV las velocidades de decaimiento serían mucho más altas y sus tiempos de vida mucho más cortos que $\sim 10^{10}$ años, la edad de la tierra, y la aparición natural de los elementos se detendría en $Z = 82$ en vez de $Z = 92$. La misma figura indica el porqué los elementos naturales conocidos hasta ahora terminan en $Z = 92$. Este es el porqué las energías del decaimiento α para núcleos con $Z > 92$ son lo suficientemente altas como para que los tiempos de vida sean cortos comparados con la edad de la tierra. Por último, una extrapolación de la figura 16-1 para $Z < 82$ muestra que los elementos correspondientes son *aparentemente* estables al decaimiento α ya que sus energías de decaimiento son tan pequeñas que los tiempos de vida son inconmensurablemente largos.

Con frecuencia los estudiantes se asombran de porqué los núcleos con Z grande emiten espontáneamente partículas, $^2He^4$, α pero no emiten espontáneamente ninguna de las partículas $^2He^3$, $^1H^2$, o $^1H^1$, aun cuando el emitir cualesquiera de estas partículas reduce la energía de Coulomb del núcleo. La razón es simplemente que para otras partículas distintas de $^2He^4$ la energía de enlace por nucleón $\Delta E/A$, es mucho menor de lo que espera un núcleo típico. Por lo tanto, su emisión no es energéticamente favorable. La emisión de una partícula $^6C^{12}$ por un núcleo de Z grande sería energéticamente favorable, ya que ésta tiene una $\Delta E/A$ alta y también reduce considerablemente la energía de Coulomb del núcleo. La emisión de una partícula con Z aún mayor sería más favorable ya que reduce aun más la energía de Coulomb. A ese proceso se le llama *fisión espontánea*. Para núcleos que ocurren de manera natural en la naturaleza con los valores de Z más altos, es decir, para Z en el intervalo justamente por debajo de 92, la razón de decaimiento por fisión espontánea es mucho menor que la razón de decaimiento por emisión de una partícula α debido a la probabilidad muy pequeña de que una partícula más masiva penetre una barrera de Coulomb mayor. Conforme Z se hace mayor que 100, la razón de decaimiento para fisión espontánea se hace comparable a, y eventualmente mayor que, la razón de decaimiento por emisión de una partícula α. La razón es que con un incremento de Z la energía de decaimiento por fisión espontánea aumenta más rápidamente que la energía de decaimiento por emisión de una partícula α de modo que la barrera de Coulomb en la fisión espontánea resulta relativamente más fácil de penetrar.

Existe una predicción reciente, y aún no verificada, de que el núcleo del elemento con $Z = 110$ y $A = 294$ deberá tener un tiempo de vida tan largo como $\sim 10^8$ años. Si así fuera, posiblemente un poco de él podría estar presente en la tierra si hace $\sim 10^{10}$ años se formó suficiente cantidad de él. La predicción se sigue de la predicción de que el número mágico de protón después de $Z = 82$ es $Z = 114$, y no $Z = 126$ como se indica en la figura 15-18 del modelo de capas. Por supuesto que la predicción de esta figura de que $N = 126$ es un número mágico de neutrón está verificada abundantemente por experimentos y también se cree que $N = 184$ es un número mágico de neutrón como se predice en la figura. Pero no existe evidencia experimental en cuanto a los valores de Z más allá de 100 ya que los núcleos correspondientes aún no se han descubierto, así, en realidad no se sabe si $Z = 126$ es mágico. La diferencia entre las predicciones recientes del modelo de capas para los números mágicos de protón y neutrón más altos surgen porque para protones existe, además del potencial nuclear, un potencial de Coulomb repulsivo que crece para núcleos de Z grande. Este tiende a alcanzar todos los niveles de protón, pero sobre todo los niveles de l pequeña cuyas densidades de probabilidad penetran al centro nuclear donde el potencial de Coulomb es más fuerte.

El resultado es elevar los niveles $2f$ y $3p$ en relación al nivel li, poniendo el nivel $1i_{13/2}$ justamente por encima del nivel $2f_{7/2}$ y creando un número mágico de protón para $Z = 100 + 14 = 114$. Entonces se cree que el núcleo con $Z = 114$ y $N = 184$ es doblemente mágico. Ese núcleo también cáe cerc, pero no sobre, la curva de máxima estabilidad que se obtiene de una extrapolación de la fórmula de masa semiempírica del modelo de la gota. En otras palabras, se espera que $Z = 114$ y $N = 184$ o $Z = 114$ y $A = 298$ sea doblemente mágico y que también tenga casi el valor más estable de z para tal valor de A. Cálculos con el modelo colectivo indican que el mejor acuerdo entre los requisitos para la estabilidad de los modelos de capas y de la gota se obtiene quitando cuatro protones para reducir la energía de Coulomb, lo cual es extremadamente importante para núcleos con Z así de grandes. Por lo tanto estos cálculos predicen máxima estabilidad para $Z = 110$ y $A = 294$. También predicen un tiempo de vida de $\sim 10^8$ años para un decaimiento por emisión de partícula α o fisión espontánea en dos núcleos más pequeños. El proceso de fisión es en realidad el más favorecido ya que es más efectivo en reducir la energía de Coulomb. Así, está predicho que $Z = 110$ y $A = 294$ sea "una isla de estabilidad en un mar de fisión espontánea".

Ejemplo 16-2. En la mezcla de isótopos que normalemente se encuentran actualmente en la tierra, el $^{92}U^{238}$ tiene una abundancia de 99.3% y el $^{92}U^{235}$ tiene una abundancia de 0.7%. Los tiempos de vida medidos de estos isótopos radiactivos son 6.52×10^9 años y 1.02×10^9 años respectivamente. Suponiendo que ellos eran igualmente abundantes cuando se formó el uranio en la tierra, estimar cuánto tiempo ha pasado desde el tiempo de formación. (Es de suponerse que los efectos de apareamiento en las relaciones de formación inicial son pequeños comparadas con los efectos de tiempo de vida en las relaciones de abundancia actuales). Si el número de núcleos de $^{92}U^{238}$ formados originalmente es N, el número presente ahora es

$$N_{238} = Ne^{-\lambda t} = Ne^{-t/T} = Ne^{-t/6.52}$$

donde t es el tiempo transcurrido en unidades 10^9 años. Puesto que el número de núcleos de $^{92}U^{235}$ formados originalmente es, por su posición también N, el número presente ahora es

$$N_{235} = Ne^{-t/1.02}$$

La abundancia de $^{92}U^{235}$ presente es

$$7 \times 10^{-3} = \frac{N_{235}}{N_{235} + N_{238}} \simeq \frac{N_{235}}{N_{238}} = \frac{Ne^{-t/1.02}}{Ne^{-t/6.52}} = e^{-(t/1.02 - t/6.52)} = e^{-0.827t}$$

así que

$$e^{0.827t} \simeq \frac{1}{7 \times 10^{-3}} = 143$$

$$0.827t \simeq \ln (143) = 4.96$$

$$t \simeq \frac{4.96}{0.827} = 6.0$$

esto es, el tiempo transcurrido es

$$t \simeq 6.0 \times 10^9 \text{ años}$$

La estimación obtenida de este argumento simple concuerda razonablemente con la estimación de la edad de la tierra, o del sistema solar, que se obtuvo a partir de argumentos geológicos y cosmológicos más sofisticados. ◀

16.3 Decaimiento Beta

En la figura 16-5 se presenta una descripción más completa del proceso que ocurre en la serie radiactiva $4n$. Además del decaimiento α está también el *decaimiento* β. Para las series

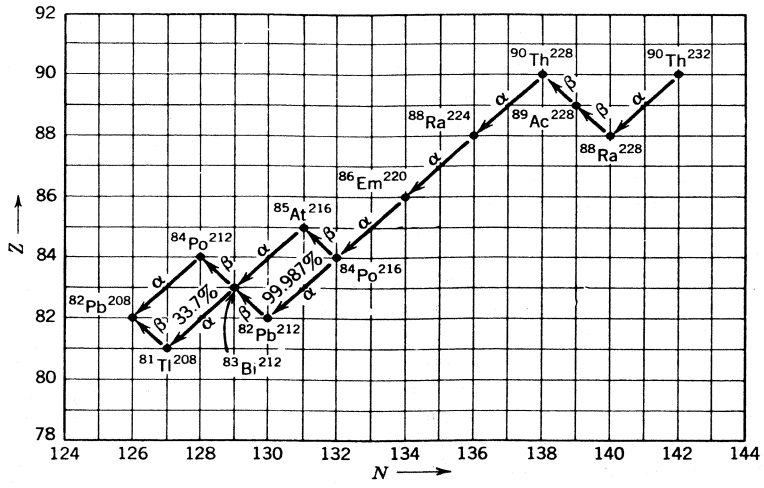


FIGURA 16-5
Proceso de decaimiento que ocurre en la serie *4n*.

radiactivas, el decaimiento β involucra un núcleo Z, A emitiendo un electrón cargado negativamente y transformándose en el núcleo $Z + 1$, A. También existen otros dos tipos de decaimiento β que se considerarán en breve.

Es instructivo el superponer la figura 16-5 a la figura 15-11, la gráfica de los valores de Z y N de los núcleos estables. El resultado, que se muestra en la figura 16-6 hace claro que las series radiactivas utilizan el decaimiento β para mantener, tan bueno como sea posible, un acoplamiento entre la pendiente promedio de trayectoria trazada por su decaimiento y la pendiente promedio de la "curva de estabilidad". Otra forma de decir esto es que la energía del

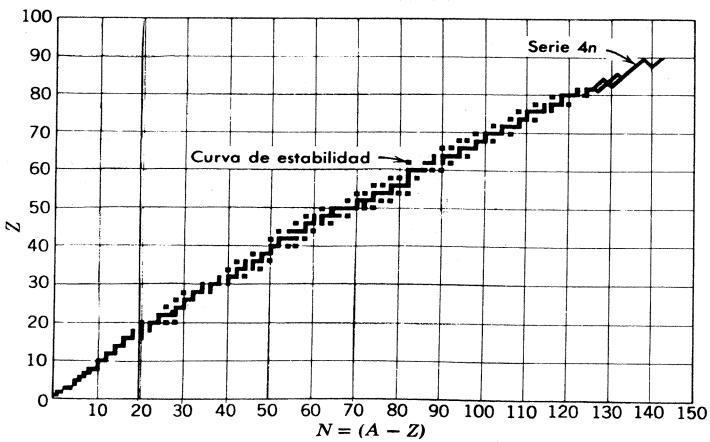


FIGURA 16-6
Se ilustra porque ocurre el decaimiento β en la serie *4n* y en otras series radiactivas.

decaimiento α de un núcleo es relativamente pequeña si el núcleo que está decayendo por β está muy lejos de la curva de estabilidad. Pero en estas circunstancias, la energía del decaimiento para ambos procesos aumentan rápidamente con el aumento de la energía de decaimiento, el núcleo en cuestión decaerá por β ya que este proceso tiene una energía de decaimiento grande así como una rapidez de decaimiento muy grande. En algunos casos, las velocidades de decaimiento para los dos procesos competitivos son comparables, ambos procesos ocurren y la serie se *ramifica* (Ver $^{84}Po^{216}$ y $^{83}Bi^{212}$ en la serie 4n).

En la primera parte de esta sección se estudiará la energética del decaimiento β. A continuación se estudiará la dependencia de la rapidez de decaimiento con la energía de decaimiento. Entonces se verá que la rapidez de decaimiento también depende fuertemente de los spin y paridades de los estados nucleares involucrados en el decaimiento. Esta dependencia con el spin y la paridad hace al proceso de decaimiento β un medio muy útil en la investigación de los núcleos.

Para estudiar la energética del decaimiento β se hace la gráfica de las masas atómicas $M_{Z,A}$, en la región de la curva de estabilidad, como una función de Z para A fija. La figura 16-7 muestra los resultados típicos para A impar y la figura 16-8 muestra los resultados típicos para A par. Excepto en las cercanías de los números mágicos, todos los resultados están bien descritos por la fórmula de masa semiempírica. Para A impar, se encuentran los valores de $M_{Z,A}$ sobre una parábola. Para A par, existen dos parábolas que corresponden a los dos signos posibles del término de apareamiento, (15-28) el superior es para Z impar, N impar y el inferior es para Z par, N par. Estas curvas se cortan en realidad con la curva de estabilidad mostrando su estructura. Especifican cómo aumentan las masas cuando los valores de Z se apartan de sus valores más estables para una A dada. Obsérvese que para un valor de A impar, generalmente existe sólo un valor de Z más estable. (Raramente existen dos valores circundando el fondo de la parábola y que ocurra que conduzcan a casi la misma masa). Para una A par dada, generalmente hay dos valores estables de Z (pero ocasionalmente existen tres).

Los núcleos cuyos valores Z no son los más estables, en consideración con sus valores A, pueden cambiar Z para alcanzar la estabilidad mediante tres diferentes procesos de decaimiento β. Uno es el proceso de *emisión de electrón* que ocurre en las series radiactivas. En este proceso, el núcleo emite un electrón cargado negativamente, así Z aumenta en uno, N decrece en uno y A permanece fijo. Los otros procesos son *captura de electrón* y *emisión de positrón*. En el primero el núcleo captura un electrón atómico cargado negativamente y en el segundo se emite un positrón cargado positivamente. En ambos Z decrece en uno, N aumenta en uno y A permanece fija.

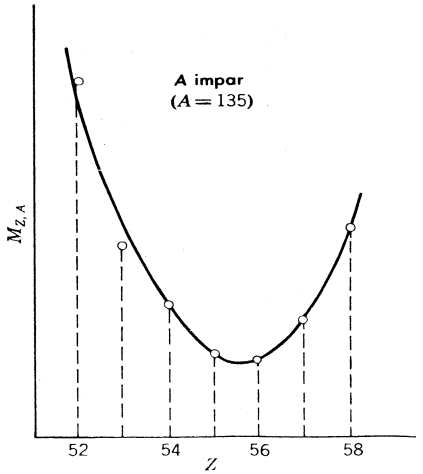


FIGURA 16-7
Masas de átomos con un valor de A impar dado. Para este ejemplo se escogió el valor $A = 135$.

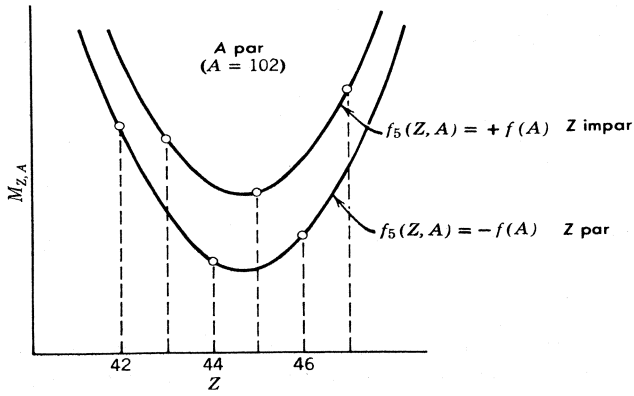


FIGURA 16-8
Masas de átomos con un valor de A par dado. Aquí se escogió el valor $A = 102$.

La emisión de un electrón ocurre si la masa $m_{Z,A}$ del núcleo inicial excede la masa $m_{Z+1,A}$ del núcleo final más una masa en reposo del electrón. El exceso de masa multiplicado por c^2 es igual a la energía E que queda disponible en el decaimiento. Esto es, la energía de decaimiento es

$$E = [m_{Z,A} - (m_{Z+1,A} + m)]c^2 \tag{16-7a}$$

Esta energía deberá ser positiva para que ocurra el decaimiento. Esto se puede escribir en términos de masas atómicas sumando y restando Z masas electrónicas en reposo, para obtener

$$E = [m_{Z,A} + Zm - (m_{Z+1,A} + Zm + m)]c^2$$

Despreciando las energías de enlace de los electrones al átomo, se obtiene el resultado simple de que *la energía de decaimiento en la emisión de electrón* es

$$E = [M_{Z,A} - M_{Z+1,A}]c^2 \tag{16-7b}$$

Se ve que la emisión de electrón ocurre cuando la masa atómica inicial excede la masa atómica final, ya que la masa del electrón sumada al átomo se compensa por la masa del electrón emitida por el núcleo.

La captura de electrón ocurre si la masa $m_{Z,A}$ del núcleo inicial más una masa de electrón en reposo excede a la masa $m_{Z-1,A}$ del núcleo final. La energía que queda disponible en el decaimiento es

$$E = [(m_{Z,A} + m) - m_{Z-1,A}]c^2 = [m_{Z,A} - (m_{Z-1,A} - m)]c^2 \tag{16-8a}$$

o

$$E = [m_{Z,A} + Zm - (m_{Z-1,A} + Zm - m)]c^2$$

En términos de masas atómicas, la *energía de decaimiento en la captura del electrón* es

$$E = [M_{Z,A} - M_{Z-1,A}]c^2 \tag{16-8b}$$

Cuando la energía es positiva ocurre la captura de un electrón. Se obtiene este resultado simple ya que la masa del electrón tomado del átomo en la captura, se compensa con la masa del electrón capturado por el núcleo.

Ocurre el positrón si la masa $m_{Z,A}$ del núcleo inicial excede a la masa $m_{Z-1,A}$ del núcleo final más una masa de positrón en reposo, la cual también es igual a m. La energía que queda disponible en el decaimiento es

$$E = [m_{Z,A} - (m_{Z-1,A} + m)]c^2 \tag{16-9a}$$

o

$$E = [m_{Z,A} + Zm - (m_{Z-1,A} + Zm - m) - 2m]c^2$$

En términos de mas atómicas, esta expresión establece que la *energía de decaimiento en la emisión de positrón* es

$$E = [M_{Z,A} - M_{Z-1,A} - 2m]c^2 \tag{16-9b}$$

En la emisión de positrón el átomo debe emitir un electrón, puesto que su núcleo emite un positrón y, por lo tanto, tiene una carga positiva menos. Entonces no puede existir la compensación de masas electrónicas encontrada en los otros procesos de decaimiento β. El resultado es que para tener la energía de decaimiento en la emisión de positrón positiva, lo cual es una condición necesaria para que ocurra el proceso, la masa atómica inicial debe exceder a la masa atómica final por más de dos masas electrónicas en reposo, $2m = 0.00110u$.

Entonces se concluye que si $M_{Z,A} > M_{Z+1,A}$ la emisión de electrón puede ocurrir. Si $M_{Z,A} > M_{Z-1,A}$ entonces puede ocurrir la captura de electrón. Pero la emisión de positrón puede ocurrir sólo si $M_{Z,A} > M_{Z-1,A} + 2m$; y en este caso también puede ocurrir la captura de electrón. Entonces existe un intervalo en el cual la diferencia en masas atómicas es tal, que la captura de electrón es posible mientras que la emisión de positrón está prohibida energéticamente. En la práctica las diferencias en masa atómica caen en este intervalo y, por lo tanto, existen en la naturaleza relativamente pocos emisores de positrón. En todos estos procesos la energía de decaimiento E varía de caso a caso desde una pequeña fracción de 1 MeV a más que 10 MeV, y típicamente es algo menor que 1 MeV.

Ejemplo 16-3. Los únicos núcleos conocidos con $A = 7$ son ^{3}Li^7, cuya masa atómica es $M_{3,7} = 7.01600u$, y ^{4}Be^7, cuya masa atómica es $M_{4,7}=7.01693u$. ¿Cuál de éstos núcleos es estable ante el decaimiento β ? ¿Qué proceso se emplea en el decaimiento β del núcleo inestable al núcleo estable?

Puesto que la masa atómica de ^{3}Li^7 es menor, este es el núcleo que es estable.

Por lo que toca a la conservación de carga, ^{4}Be^7 inestable podría decaer en el núcleo estable ya sea por captura de un electrón atómico o por emisión de un positrón. Pero por lo que toca a la conservación de la energía, solamente es posible la captura de un electrón ya que la diferencia en las masas atómicas $M_{4,7} - M_{3,7} = 7.01693u - 7.01600u = 0.00093u$,es menor que dos masas electrónicas, $2m = 0.00110u$. Entonces la captura de electrón es el proceso utilizando en el decaimiento β del ^{4}Be^7 en ^{3}Li^7. ◀

Consideremos ahora la cuestión muy interesante de qué sucede a la energía de decaimiento en el proceso de decaimiento β. Se tomará el más común, la emisión de electrón. Un núcleo Z, A que se supone estacionario en el estado inicial, emite un electrón y retrocede, como se indica en

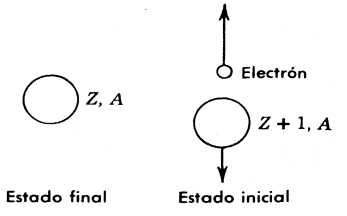


FIGURA 16-9
Proceso de emisión de electrón, suponiendo (incorrectamente, como se verá) que el estado final sólo lo componen dos partículas.

la figura 16-9. Si en el estado final existen justamente dos partículas, sólo puede existir una forma de conservar el impulso lineal en la cual la energía disponible, que es la energía de decaimiento E, se pueda repartir. De hecho, puesto que los núcleos son muy masivos sus velocidades de retroceso son extremadamente lentas y prácticamente no llevan energía cinética. Entonces, el electrón deberá llevar casi toda la energía de decaimiento E, en la forma de energía cinética. Pero mediciones hechas con anterioridad en el estudio de la radiactividad, utilizando imanes deflectores, muestran que los electrones se emiten con un espectro de energía cinética K_e, como se indica en la figura 6-10.

El hecho de que los electrones en el decaimiento β se emitan con un espectro de energías, fue por muchos años muy misterioso y confuso. Los electrones emitidos en el punto extremo $K_e^{\max}$ del espectro llevan toda la energía del decaimiento E, ya que $K_e^{\max}$ se observó igual a E dentro de la precisión experimental. Esto es

$$K_e^{\max} = E \tag{16-10}$$

Pero los electrones típicos llevan mucho menos de la energía E la cual, según muestra la diferencia de masas medidas, deberá liberarse en el proceso. Parecerá que algo de esta energía, ¡se ha perdido! Se han hecho varios intentos para detectar la pérdida de energía, por ejemplo colocando el material radiactivo β dentro de un calorímetro con paredes de plomo muy gruesas, pero fue infructuoso. La situación fue lo suficientemente grave como para que algunos físicos empezaran a considerar seriamente el abandonar la ley de la conservación de la energía relativista, cuando Pauli propuso una alternativa menos repugnante.

En 1931 Pauli postuló que una partícula, ahora llamada *antineutrino* $\bar{\nu}$, también se emite en el proceso de emisión de electrón, pero que normalmente no se detecta debido a que *su interacción con la materia es extremadamente débil.* También postuló que el antineutrino tiene (1) *carga cero,* (2) *spin intrínseco* $s = 1/2$, y (3) *masa en reposo cero.* La primera propiedad permite que la conservación de carga se mantenga en la emisión de electrón. La segunda propiedad permite que el impulso angular se conserve. Considere que el núcleo Z, A al emitir un electrón resulte en el núcleo $Z + 1$, A y suponga, por ejemplo, que A es par. Entonces el spin nuclear i es un entero tanto en el núcleo inicial como en el final. Si sólo se emitiera el electrón con spin intrínseco $s = 1/2$, sería imposible conservar el impulso angular, ya que la suma de un impulso angular semientero (el del electrón) y un impulso angular entero (el del núcleo final) sólo puede ser semientero. Si también se emite un antineutrino con $s = 1/2$, se elimina la dificultad. La tercera propiedad se postuló para estar de acuerdo con la observación de que el punto

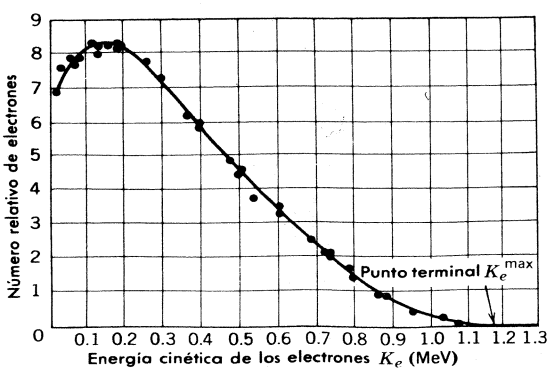


FIGURA 16-10
Espectro de electrones emitidos en el decaimiento β del $^{83}Bi^{210}$.

extremo K_e^{max} del espectro del electrón fuera igual con la energía de decaimiento E. Cuando ocurre que un electrón se emite en el punto extremo, éste se lleva toda la energía de decaimiento y no queda nada para la energía de la masa en reposo del antineutrino. En la emisión de positrón y en la captura de electrón, la partícula que se emite aunque muy difícil de detectar, se le llama el *neutrino* ν. Tiene la misma carga cero, spin 1/2 y masa en reposo cero que el antineutrino.

La relación entre los neutrinos y los antineutrinos queda explicada por la mecánica cuántica relativista de Dirac. Esta teoría muestra que cualquier partícula con spin intrínseco $s = 1/2$ tiene su antipartícula. Un ejemplo familiar, e íntimamente relacionado, es el electrón y su antipartícula llamada el positrón. (Ejemplos no relacionados son el protón y el antiprotón, y el neutrón y antineutrón). La teoría también muestra que cuando se produce una partícula se debe producir una antipartícula relacionada. El ejemplo familiar es, otra vez, el electrón y el positrón, los cuales se producen en pares. Esto también se encuentra en los tres procesos de decaimiento β. En la emisión de electrón se produce una partícula (electrón) con una antipartícula (antineutrino), mientras que en la emisión de positrón se produce una partícula (neutrino) con una antipartícula (positrón). La captura de electrón cae en este esquema ya que en la teoría de Dirac la destrucción de un electrón es idéntica a la creación de un positrón.

La figura 16-11 ilustra esquemáticamente la emisión de electrón y positrón en términos de diagramas de Dirac de niveles de energía para las partículas relacionadas, electrones y neutrinos. En la discusión de la figura 2-15 se vio que, en la producción de pares, la energía de un fotón absorbido hace posible la transición de un electrón de masa en reposo m desde uno de los niveles llenos en el mar de electrones que se extienden hacia abajo a partir de $-mc^2$ a uno de los niveles llenos que se extienden hacia arriba desde $+mc^2$. El resultado es un electrón en un nivel de energía positiva y un agujero en un nivel de energía negativa, el cual es un positrón. Esa transición podría representarse por una flecha vertical que conecta los niveles inferior y superior. En una forma similar se puede representar una transición de emisión de electrón por una flecha diagonal que conecta un nivel de neutrino lleno con un nivel de electrón vacío, como se muestra en la figura 16-11. La energía que queda disponible por la diferencia en las masas nucleares convierte un neutrino del mar de neutrinos en un electrón, dejando un agujero en un nivel de neutrino, el cual es un antineutrino. La flecha diagonal que conecta un nivel de electrón lleno con un nivel de neutrino vacío representa la emisión de positrón ya que el resultado es un agujero en un nivel de electrón, o positrón y un neutrino. Observe que no existe brecha que se separe los niveles de neutrino lleno y vacío debido a que los neutrinos tienen masa en reposo cero. Observe también que la energía mínima que puede proporcionar la diferencia en masa nuclear para hacer posible alguno de los procesos de decaimiento β es una energía de una masa electrónica en reposo, mc^2, de acuerdo con (16-9a) y (16-7a).

Existe una diferencia obvia entre una partícula y su antipartícula si éstas son cargadas, ya que sus cargas son de signo opuesto. La diferencia es más sutil, si la partícula y la antipartícula son neutras, como en el neutrino y el antineutrino. Sin embargo, existe una diferencia. Evidencia reciente, que se estudiará

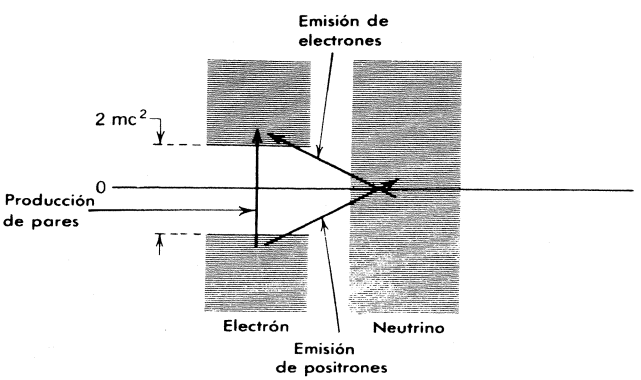


FIGURA 16-11
Diagrama de niveles de energía de Dirac para el electrón y el neutrino, ilustrando la producción de pares, emisión de electrón y emisión de positrón.

enseguida, muestra que la componente del impulso angular intrínseco de spin a lo largo de la dirección del movimiento es siempre $-\hbar/2$ para un neutrino y siempre $+\hbar/2$ para un antineutrino.

El problema relativo a la emisión de electrones con un espectro de energías se resuelve mediante el postulado de que en el decaimiento β también se emite un antineutrino, ya que entonces la energía de decaimiento E se puede repartir entre la energía cinética del electrón K_e y la energía cinética del antineutrino $K_{\bar{\nu}}$. Esto es

$$K_e + K_{\bar{\nu}} = E \tag{16-11}$$

donde se ignora la energía de retroceso del núcleo. Como existen muchas formas en la cual se puede realizar esta división de energía, los valores de K_e forman un espectro. Si el argumento se hace cuantitativo, se puede obtener un acuerdo detallado con las formas medidas de los espectros. Esto involucra el uso de procedimientos estadísticos, similares pero algo más complicados que los utilizados en los capítulos 1 y 11, para determinar el número de divisiones en energía en cada intervalo de K_e.

Los resultados se expresan y explican de manera más conveniente en términos del *espectro de impulsos* $R(p_e)$, el cual es la razón de emisión de electrones con impulso lineal p_e por unidad de tiempo y por unidad de impulso. Se encuentra que

$$R(p_e) \simeq \left[\frac{(E - K_e)^2 p_e^2}{2\pi^3 \hbar^7 c^3}\right] M^* M \tag{16-12}$$

donde M es el *elemento de matriz en el decaimiento* β.

$$M = \int \psi_f^* \beta \psi_i \, d\tau \tag{16-13}$$

En (16-12) el término $(E - K_e)^2 = K_{\bar{\nu}}^2$ es proporcional a $p_{\bar{\nu}}^2$, el cuadrado del impulso lineal de un antineutrino. Así, la razón R es proporcional al producto de dos factores, cada uno de los cuales es el cuadrado del impulso de una de las partículas emitidas en el decaimiento β. Estos factores p^2 son justamente mediciones del número de estados cuánticos por unidad de intervalo de impulso en los cuales el antineutrino o el electrón se pueden emitir en el decaimiento. Ambos se pueden obtener mediante una modificación trivial del argumento presentado en el ejemplo 1-3. Si la longitud de onda λ permitida en la figura 1-7 se considera como la longitud de onda de de Broglie de una partícula en una caja, entonces es posible transformar (1-15) de la forma $N(r) \propto r^2$ a la forma $N(p) \propto p^2$ ya que r en esta ecuación es inversamente proporcional a λ de acuerdo con de de Broglie, es inversamente proporcional al impulso p de la partícula. Entonces se ve que $N(p)$, el número de estados permitidos por unidad de intervalo de impulso para un antineutrino o electrón de impulso p, el cual está confinado a una caja, es proporcional a p. La caja es un artificio matemático utilizado para normalizar las eigenfunciones de la partícula libre que representan al antineutrino o al electrón emitido, tal como se analizó en la sección 6-2.

En otras palabras, si una partícula está confinada a una caja (de dimensiones arbitrariamente grandes) de modo que su eigenfunción se puede normalizar, ya no continúa siendo estrictamente una partícula libre, y entonces tiene un conjunto discreto de estados cuánticos disponible. El número de estos estados por unidad de impulso es proporcional al cuadrado de su impulso. Si se hace la suposición estadística usual de que todas las divisiones de energía o impulso posibles ocurren con la misma probabilidad, la razón para un decaimiento β con una división particular será proporcional al número total de estados para esta división, que es el número de estados para una partícula, multiplicado por el número de estados para la otra. Entonces la razón R será proporcional al factor de impulsos para densidad de estados para el antineutrino multiplicado por el factor de impulso para la densidad de estados del electrón. Así, se ve cómo la forma del espectro de impulsos del electrón está gobernado por los términos

dentro de los paréntesis cuadrados de (16-12). El espectro es simétrico alrededor de un máximo en el impulso que representa equipartición de impulso entre el electrón y el neutrino. La razón es que si una de estas partículas toma más impulso en el decaimiento, la otra deberá tomar menos y esto hará decrecer el valor del producto de los dos factores de densidad de estados.

El término M^*M en (16-12) gobierna la magnitud del espectro de impulsos y, por lo tanto, la razón total de emisión de electrones en el decaimiento β. La ecuación (16-13) muestra que M depende del valor de una cantidad β, que será identificada en los párrafos siguientes. También depende de la eigenfunción ψ_i del núcleo que decae por β en su estado inicial (antes del decaimiento) y del complejo conjugado de la eigenfunción ψ_f del núcleo en su estado final (después del decaimiento). Se verá que el elemento de matriz M en el decaimiento β es en realidad una medida de qué tan fácil es para el núcleo cambiar desde su estado inicial hasta su estado final.

Las ecuaciones (16-12) y (16-13) son análogas a (8-42) y (8-43) que desarrolló para la razón de emisión de fotones en el decaimiento de un estado excitado de un átomo. En particular, el elemento de matriz en el decaimiento β es análogo al elemento de matriz de momento dipolar eléctrico

$$\left| \int \psi_f^* e\mathbf{r} \psi_i \, d\tau \right|$$

que interviene en la teoría del "decaimiento de fotón" en los átomos. El elemento de matriz en el decaimiento β es una integral de volumen de la cantidad tomada entre la eigenfunción del núcleo en su estado inicial y el complejo conjugado de la eigenfunción del núcleo en su estado final. Así, M es algo como un promedio de la cantidad β, evaluada mientras el núcleo está en le proceso de decaimiento y es una mezcla de los dos estados. Entonces β, tiene una función en el gobierno de la razón de decaimiento β más similar a la función que tiene el momento dipolar eléctrico $e\mathbf{r}$, en el gobierno de la razón de decaimiento por fotón de los átomos.

Las ecuaciones (16-12) y (16-13) las obtuvo Fermi por primera vez, bajo la suposición simple de que la interacción de Coulomb entre los núcleos y los electrones emitidos se podrían despreciar. También supuso que β es una constante universal llamada la *constante de acoplamiento del decaimiento* β. Entonces el elemento de matriz M del decaimiento β inmediatamente se reduce a

$$M = \beta \int \psi_f^* \psi_i \, d\tau = \beta M' \tag{16-14}$$

donde M' es el llamado *elemento de matriz nuclear*

$$M' = \int \psi_f^* \psi_i \, d\tau \tag{16-15}$$

La teoría de Fermi de la emisión del electrón por núcleos esta íntimamente relacionada con la teoría de emisión de fotón por átomos. Tal vez la mayor diferencia es que la teoría de Fermi se complica por el hecho de que emiten dos partículas que se reparten la energía disponible. En efecto, la mayor similitud es que en ambas teorías ninguna de las partículas emitidas se considera que tenga existencia prioritaria (son *creadas* en el instante de la emisión). Debe enfatizarse que el decaimiento β no es una consecuencia de la fuerza o interacción nuclear, por el contrario, el decaimiento es una consecuencia de una interacción que no se ha encontrado previamente en el estudio de la física cuántica, la *interacción de decaimiento* β. Esta es una de las cuatro interacciones fundamentales de la naturaleza, las otras tres son las interacciones nuclear, electromagnética y gravitacional. En la siguiente sección se estudiarán las propiedades de la interacción del decaimiento β y se encontrará que ésta es un conjunto aparte de las otras interacciones fundamentales dada la diferente magnitud de su intensidad, la cual está gobernada por el valor de la constante de acoplamiento β. También se verá que la

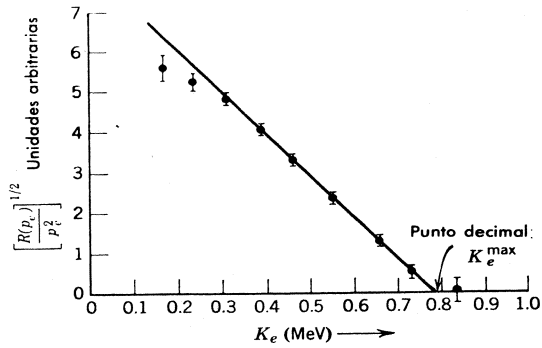


FIGURA 16-12
Gráfica de Kurie para el decaimiento β del neutrón

interacción de decaimiento β tiene propiedades que tienen que ver con la paridad, las cuales son totalmente distintas a las de las otras interacciones.

La función $R(p_e)$, de (16-12) es el espectro de impulsos de los espectros emitidos. También se aplica a la emisión de positrón. La ecuación predice que una gráfica de $[R(p_e)/p_e^2]^{1/2}$ en función de $(E - K_e)$, o simplemente en función de K_e, producirá una línea recta. La figura 16-12 muestra esta gráfica de Kurie para el más simple de todos los procesos de emisión de electrón

$$ {}^0n^1 \rightarrow {}^1H^1 + e + \bar{\nu} \tag{16-16} $$

el decaimiento de un neutrón libre ${}^0n^1$ en un protón ${}^1H^1$ más un electrón e y un antineutrino $\bar{\nu}$. El neutrón decae ya que $[M_{0,1} - M_{1,1}]c^2 = +0.78$ MeV y el tiempo de vida T del decaimiento es aproximadamente 1000 segundos. (Un neutrón en un núcleo estable no decae por β en un protón porque se lo impide la interacción nuclear que es mucho más intensa que la interacción de decaimiento β. La comparación en la figura 16-12 es típica de una buena concordancia obtenida entre la teoría y el experimento para el decaimiento β de núcleos de Z pequeña. Algunas veces se ven pequeñas desviaciones de los datos experimentales para energía bajas, pero usualmente representan problemas experimentales con autoabsorción de electrones de baja energía en la fuente del material que decae por β. Para núcleos con Z alta, existen diferencias reales entre las predicciones de la teoría de Fermi y la experimentación. Esto se debe al hecho de haber despreciado la interacción de Coulomb entre el núcleo final y el electrón o positrón emitido. Esa interacción desacelera los electrones o acelera los positrones, su efecto es favorecer el extremo de baja energía o impulso de los espectros para electrones, o desaparecer este extremo de los espectros para positrones.

Integrando el espectro de impulsos de (16-12) sobre todos los impulsos de los electrones hasta el impulso máximo p_e^{max}, se obtiene una expresión para la rapidez total de emisión de electrones. Ya que esto es justamente la *razón de decaimiento* R, de acuerdo con (16-4) su recíproco es el tiempo de vida T. Resultando

$$ R = \frac{1}{T} \simeq \frac{m^5c^4}{2\pi^3\hbar^7}\beta^2 M'^* M' F \tag{16-17} $$

donde F es una función del impulso máximo p_e^{max}, o de la correspondiente energía cinética máxima que es el punto extremo en la energía K_e^{max}. En la figura 16-13, se grafica F como función de K_e^{max}. Obsérvese que F aumenta muy rápidamente con el incremento de K_e^{max}. Las correcciones hechas a la teoría para dar cuenta del efecto de la interacción de Coulomb sobre los electrones emitidos cambian los valores de F. Para Z pequeña el cambio en F es despreciable, pero para $Z = 100$ y $K_e^{max} = 1$ MeV, F aumenta por un factor 100 para la emisión de electrón o decrece por un factor 10 para la emisión del positrón.

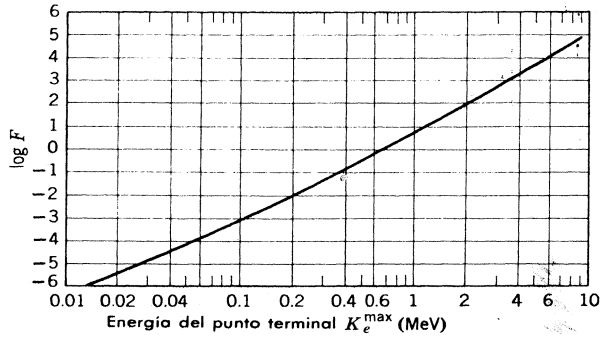


FIGURA 16-13
Gráfica logarítmica de base 10 de la función F en función de la energía del punto extremo K_e^{max} del decaimiento β de núcleos de Z muy pequeña. La rapidez de decaimiento es proporcional a F. Entonces como F aumenta con el incremento de la energía del punto extremo, la rapidez de decaimiento aumenta y el tiempo de vida decrece.

De (16-17) se ve que el tiempo de vida T de un núcleo que decae por β decrece rápidamente con el aumento del punto extremo de la energía K_e^{max}, con la energía de decaimiento $E = K_e^{max}$, debido al crecimiento en el valor de F al crecer la energía. Para núcleos que decaen por β y que ocurren naturalmente T va desde $\sim$1 seg para E de alrededor de varios MeV, hasta $\sim 10^8$ seg para E de algunos cientos de MeV.

De (16-17) también se ve que la cantidad

$$FT \simeq \frac{2\pi^3\hbar^7}{m^5c^4}\frac{1}{\beta^2}\frac{1}{M'^*M'} \tag{16-18}$$

depende de una gran cantidad de constantes universales y del valor del elemento de matriz nuclear

$$M' = \int \psi^*_{Z\pm1,A}\psi_{Z,A}\,d\tau \tag{16-19}$$

Esta expresión para el elemento de matriz nuclear es justamente (16-15) con los subíndices en las eigenfunciones inicial y final al reescrito para indicar que la teoría se aplica tanto a la emisión de electrones como a la emisión de positrones. A la cantidad FT se le llama con frecuencia el *tiempo de vida comparativo*. Se puede utilizar para comparar los decaimientos β de diferentes energías de decaimiento y registrarlas de acuerdo con los tiempos de vida que tendrían si todos tuvieran la misma energía de decaimiento. Esto es, multiplicando T por F se elimina la dependencia con la energía y asi se produce una cantidad cuyo valor sólo depende de una gran cantidad de constantes universales y del valor del elemento de matriz nuclear. Puesto que el elemento de matriz contiene las eigenfunciones para los estados nucleares involucrados en un decaimiento β es evidente que el valor de FT para el decaimiento puede proporcionar información sobre aquellos estados nucleares.

Ejemplo 16-4. Uno de los decaimientos β más simples es

$$^1H^3 \rightarrow {}^2He^3 + e + \bar{\nu}$$

Los valores medidos de la energía de decaimiento y la vida media son $E = 0.0186$ MeV y $T_{1/2} = 12.3$ años. Calcular el valor FT.

La razón por la que $\Delta i = 0$ está permitida por las reglas de Gamow-Teller es que es posible que se emitan las dos partículas con spin esencialmente paralelos, llevando de este modo una unidad de impulso angular, con el núcleo cambiando la orientación en el espacio pero sin cambiar la magnitud de su spin. Pero esto no es posible, como se indica en el comentario entre paréntesis, si el spin nuclear es cero. En un decaimiento del tipo de Fermi los spin de las partículas son "antiparalelos" y el spin nuclear será cero.

Aún si Δi es mayor que uno, puede ocurrir el decaimiento β en forma tal que el impulso angular se siga conservando ya que las partículas se pueden emitir con impulso angular orbital. Pero las razones de decaimiento para estos procesos *prohibidos* son mucho menores que los procesos *permitidos* que satisfacen las reglas de selección de Fermi o Gamow-Teller. Las razones de decaimiento decrecen por algo así como un factor de 10^{-3} por cada unidad del impulso angular orbital que llevan las partículas. Estos factores de inhibición resultan de la baja probabilidad de emitir una partícula con impulso angular orbital de una o más $\hbar$ desde un sistema de radio tan pequeño como el radio característico de un núcleo, si la partícula tiene impulso lineal tan pequeño como el característico del decaimiento β

Para muchos físicos nucleares el decaimiento β es su campo de investigación favorito porque provee información valiosa sobre los núcleos. Para obtener el valor de F a partir de una curva como la de la figura 16-3, si Z es pequeña, se utiliza una medición del punto extremo $K_e^{\max}$, o de las masas atómicas, para determinar la energía de decaimiento E. Si Z no es pequeña, el valor de F se obtiene de tablas que contienen F en función de $K_e^{\max}$ y Z. A continuación se calcula FT a partir del valor medido de la vida media, o del tiempo de vida, como en el ejemplo 16-4. Entonces se utiliza (16-18) para evaluar el elemento M' de la matriz nuclear. El orden de magnitud de M' es suficiente para dar información sobre los spin y paridades de los estados nucleares que participan en el decaimiento de (16-19). Se pueden dar más detalles sobre las eigenfunciones de estos estados. Por supuesto que primero es necesario conocer el valor de la constante de acoplamiento β en el decaimiento β. Esta cantidad se evalúa experimentalmente de los decaimientos β que involucran ciertos estados nucleares muy simples para los cuales M' ya se conoce de otras consideraciones que se estudiarán en este texto.

16.4 La interacción del decaimiento beta

La interacción del decaimiento β es la menos familiar de las cuatro interacciones, fundamentales (nuclear, electromagnética, de decaimiento β, gravitacional) que gobiernan la operación de todo en el universo. En esta sección se analizarán algunas de sus propiedades. Se empezará utilizando el decaimiento β de $^1H^3$ a $^2He^3$ que se consideró en el ejemplo 16-4 para determinar el valor de la constante de acoplamiento del decaimiento, la cual especifica la intensidad de la interacción.

Puesto que en el ejemplo 16-4 se encontró que el valor FT para el decaimiento β $^1H^3 \rightarrow {}^2He^3 + e + \bar{\nu}$ es particularmente pequeño, la proporcionalidad inversa entre FT y M'^*M', de (16-18) establece que el elemento de matriz nuclear M' es particularmente grande para este decaimiento. De hecho, existe una razón para creer que esto supone el valor máximo permitido por la condición de normalización $M' = 1$. La figura 16-14 proporciona la descripción del modelo de capas de los estados base de los dos núcleos, los cuales son los estados involucrados en el decaimiento β. Ya que los nucleones están en la subcapa $1s_{1/2}$ que tiene $j = 1/2$ y paridad par, de acuerdo con el modelo de capas ambos estados base deberán tener spin nuclear $i = 1/2$ y paridad par. Estas predicciones se confirman por mediciones independientes de los spin y paridades. Por lo tanto, el decaimiento β entre estos estados ciertamente está permitido por las reglas de selección de Fermi. Pero en este decaimiento, el modelo de capas hace casi exacta aún la predicción más fuerte $M' = 1$. Puesto que todos los nucleones están en la misma subcapa, las eigenfunciones para los dos núcleos pueden diferir sólo si difieren las interacciones nuclear o de Coulomb entre los nucleones. Las interacciones de Coulomb difieren

Puesto que Z es muy pequeña, de la figura 16-13 se puede evaluar F utilizando $K_e^{\max} = E = 0.0186$ MeV. Se encuentra

$$\log F \simeq -5.7$$

o

$$F \simeq 2.1 \times 10^{-6}$$

Convirtiendo $T_{1/2}$ en años al tiempo de vida T en segundos se obtiene

$$T = \frac{T_{1/2}}{0.693} = \frac{12.3 \text{ años} \times 365 \text{ días/años} \times 24 \text{ horas/días} \times 60 \text{ min/hora} \times 60 \text{ seg/min}}{0.693} \simeq 5.6 \times 10^8 \text{ sec}$$

así

$$FT \simeq 2.1 \times 10^{-6} \times 5.6 \times 10^8 \text{ seg} = 1.2 \times 10^3 \text{ seg}$$

Este es uno de los valores FT más pequeños observados. En otras palabras, el decaimiento β es inherentemente rápido debido a que su tiempo de vida T es pequeño, considerando el valor F que está obligado por el valor de la energía de decaimiento E. En el ejemplo 16-5 se verá que este hecho tiene algunas consecuencias teóricas importantes.

También tiene algunas consecuencias prácticas importantes. Las pruebas sin control de las bombas de hidrógeno en la década de los 50 produjeron grandes cantidades de $^1H^3$ (tritio) en la atmósfera. Como el decaimiento β de este isótopo radiactivo es inherentemente rápido, la mayor parte de este tritio ha decaído en el isótopo estable inocuo $^2He^3$. ◀

Como (16-18) muestra que el valor FT es inversamente proporcional al valor de M'^*M', que es el producto del elemento de matriz nuclear y su complejo conjugado, se ve que FT es un mínimo cuando M'^*M' es un máximo. Esto ocurre cuando la eigenfunción nuclear inicial $\psi_{Z,I}$ es idéntica a la eigenfunción nuclear final $\psi_{Z\pm1,A}$, ya que entonces la condición de normalización para eigenfunciones exige que (16-19) conduzca a $M' = 1$. Si las eigenfunciones no son idénticas $M'^*M' < 1$, y se hace más pequeño conforme las funciones se hacen menos similares. De hecho M', y, por lo tanto, M'^*M', es exactamente cero si $\psi_{Z,A}$ y $\psi_{Z\pm1,I}$ son tan diferentes que correspondan a valores diferentes del spin nuclear i, o a paridades nucleares opuestas. Estas dos propiedades dan de inmediato las *reglas de selección de Fermi.*

$$\Delta i = 0 \qquad \text{(16-20)}$$

La paridad nuclear no debe cambiar

Según la teoría de Fermi, si alguna se viola no puede ocurrir el decaimiento β. La primera restricción refleja el hecho de que en la teoría no se permite la emisión de partículas que llevan impulso angular, de modo que la ley de conservación requiere que no haya cambio en el impulso angular nuclear. La segunda restricción surge debido a que el integrando tendrá paridad impar si las eigenfunciones tienen paridad opuesta y entonces la contribución al integral proveniente del punto x, y, z se cancelarán con la contribución del punto $-x, -y, -z$. (Recuerde los argumentos del final de la sección 8-7).

Una teoría desarrollada posteriormente por Gamow y Teller incluyó los spin de las partículas emitidas y mostró que la primera regla de selección de Fermi es muy restrictiva. Las restricciones que impone la teoría de Fermi provienen de la circunstancia de que el elemento de matriz en (16-13) no incluye los spin. En la teoría de Gamow-Teller el elemento de matriz correspondiente contiene el spin del neutrón que se convierte en un protón y el spin del neutrino que se convierte en un electrón en el decaimiento β. Si las dos partículas emitidas en el decaimiento tienen sus spin intrínsecos $S = 1/2$ es esencialmente paralelos, también se permite $\Delta i = \pm 1$. Por lo tanto, se tienen las *reglas de selección de Gamow-Teller*

$$\Delta i = 0, \pm 1 \text{ (pero no } i_i = 0 \rightarrow i_f = 0) \qquad \text{(16-21)}$$

La paridad nuclear no debe cambiar

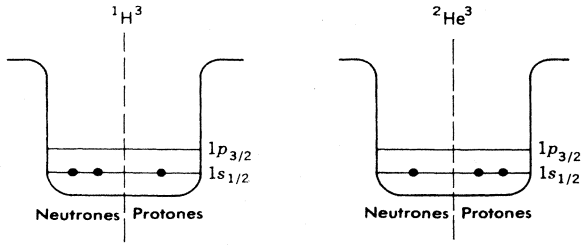


FIGURA 16-14
Descripción del modelo de capas de los estados base del par de núcleos $^1H^3$ y $^2He^3$.

para los dos núcleos, pero son despreciables comparadas con las intensas interacciones nucleares y existe mucha evidencia de que las interacciones nucleares son las mismas puesto que son independientes de la carga y, por lo tanto, no distinguen entre neutrones y protones. Entonces las dos eigenfunciones serán esencialmente idénticas y, si están normalizadas adecuadamente, la integral será

$$M' = \int \psi^*_{2,3}\psi_{1,3}\, d\tau = \int \psi^*_{1,3}\psi_{1,3}\, d\tau = 1$$

Conociendo el valor de M', se puede utilizar el valor FT medido para evaluar β, la constante de acoplamiento de decaimiento β. Hay que hacer énfasis en que la conclusión que $M' = 1$ depende de la simetría particular encontrada entre el comportamiento de los neutrones y protones en los dos núcleos involucrados en el decaimiento. En el primer núcleo existe un par de nucleones de una especie y un nucleón no apareado de la otra especie en la misma subcapa exactamente lo mismo es cierto en el segundo núcleo a pesar de que se invierten las especies de los nucleones.

Ejemplo 16-5. Utilice el valor FT para el decaimiento β del Ejemplo 16-4, y la conclusión $M' = 1$ para este decaimiento, para evaluar la constante β de acoplamiento del decaimiento β. La ecuación (16-18) resulta

$$\beta^2 \simeq \frac{2\pi^3\hbar^7}{FTm^5c^4}\frac{1}{M'^*M'}$$

de modo que

$$\beta^2 \simeq \frac{2\pi^3(1.05 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg})^7}{1.2 \times 10^3\,\text{seg} \times (0.91 \times 10^{-30}\,\text{kg})^5 \times (3.0 \times 10^8\,\text{m/seg})^4}\frac{1}{1}$$

o

$$\simeq 1.4 \times 10^{-123}\,\text{joule}^2\text{-m}^6$$

Entonces,

$$\beta \simeq 3.7 \times 10^{-62}\,\text{joule-m}^3$$ ◀

Existen otros muchos pares de núcleos cuyos estados base tienen descripciones según el modelo de capas con el mismo tipo de simetría entre neutrones y protones como en la figura 16-14. Como un ejemplo de esos pares está el $^3Li^7$ y $^4Be^7$. Un miembro de cada par decae por β en el otro con un elemento de matriz nuclear M' que con certeza deberá ser casi igual a 1. Los valores FT medidos para estos decaimientos conducen, mediante cálculos como los del

ejemplo 16-5, a valores de β que concuerdan muy bien con los valores que se obtuvieron. Por lo tanto, se concluye que la constante de acoplamiento para el decaimiento β tiene el valor *muy* pequeño

$$\beta \sim 10^{-62} \text{ joule-m}^3 \tag{16-22}$$

Si se divide β entre el volúmen de un núcleo típico $(5 \times 10^{-15} \text{ m})^3 \sim 10^{-43} \text{ m}^3$, se obtiene 10^{-62} joule-m^3/10^{-43} m^3 = 10^{-19} joule $\simeq 10^{-6}$ MeV. Entonces, se puede hacer una comparación de esta energía característica a la energía del orden de 1 MeV que caracterizà la interacción nuclear. Como lo que interviene en las cantidades mensurables, como lo es el valor FT, es el cuadrado de la constante de acoplamiento, es correcto decir que la interacción de decaimiento β *es más débil que la interacción nuclear por un factor de* 10^{-12}. Puesto que la interacción nuclear es sólo uno o dos órdenes de magnitud más intensa que la interacción electromagnética (véase sección 15-2), la interacción de decaimiento β es también mucho más débil que la interacción electromagnética. Por otra parte, la interacción gravitacional es más débil que la interacción nuclear por aproximadamente 40 órdenes de magnitud (ver también sección 15-2), así la interacción de decaimiento β es más intensa que la interacción gravitacional por cerca de 30 órdenes de magnitud. Por lo tanto, existen diferencias extremadamente pronunciadas en la intensidad entre la interacción de decaimiento β y las otras interacciones fundamentales. Estos temas se estudiarán con más profundidad en el capítulo siguiente donde se verá, por ejemplo, que la interacción gravitacional es la más obvia en el mundo cotidiano, sin tomar en cuenta el hecho de que inherentemente es, con mucho, la más débil, ya que tiene un alcance amplio y siempre el mismo signo.

El alcance de una interacción es una característica tan importante como su intensidad. La interacción gravitacional tiene un alcance amplio ya que la energía de interacción gravitacional entre dos objetos masivos decrece muy lentamente conforme crece la separación r (en proporción a $1/r$). La interacción electromagnética también tiene un alcance grande ya que la energía de interacción entre dos objetos cargados tiene la misma dependencia lenta con su separación. La interacción nuclear tiene un alcance corto porque la energía de interacción se corta bruscamente cuando dos nucleones están separados por más de aproximadamente 2F. *La interacción del decaimiento β tiene un alcance extremadamente corto.* De las consideraciones siguientes se encuentra algo de evidencia para ésto. La forma para el elemento de matriz M del decaimiento β que se utiliza en la teoría de Fermi, (16-14)

$$M = \beta \int \psi_f^* \psi_i \, d\tau$$

se obtiene de la suposición de que la extensión en el espacio de la interacción del decaimiento β es muy pequeña comparada con las dimensiones del núcleo. Sin esta suposición el integrando en M no sería $\psi_f^* \psi_i$, sino $\psi_f^* \psi_i$ promediado sobre un volumen de dimensiones igual al alcance de la interacción. Si este fuera el caso, M se afectaría de tal modo que cambiarían las predicciones de la teoría para la forma de los espectros de impulso de los electrones emitidos en el decaimiento β Pero los espectros de impulso observados concuerdan muy bien con las predicciones teóricas. Entonces, la suposición de un intervalo muy corto para la interacción β que es la predicción establecida, es probablemente correcta. En el siguiente capítulo se presentará evidencia adicional que sostiene esta conclusión.

El valor muy pequeño de β es responsable por el hecho de que los neutrinos y antineutrinos interaccionan tan débilmente con la materia que son muy difíciles de detectar. Los cálculos muestran que cuando ésto se produce en un decaimiento β que sigue a las reacciones nucleares en el centro del sol, pueden viajar hasta la superficie con una probabilidad muy pequeña de ser absorbidas. Esto tiene un efecto en la producción de energía solar. La interacción del decaimiento β de electrones y positrones es igualmente débil, pero como estas partículas también interactúan con la materia mediante interacción electromagnética, son fáciles de detectar.

A pesar de las dificultades obvias debidas a la extrema debilidad de su interacción con la materia los antineutrinos fueron detectados en 1953 por Reines y Cowan, quienes utilizaron la reacción

$$\bar{\nu} + {}^{1}\mathrm{H}^{1} \rightarrow {}^{0}n^{1} + \bar{e}$$

donde el símbolo $\bar{e}$ indica un positrón. Esta es el inverso de la reacción

$${}^{0}n^{1} + \bar{e} \rightarrow {}^{1}\mathrm{H}^{1} + \bar{\nu}$$

que es una forma alternativa del decaimiento del neutrón, (16-16)

$${}^{0}n^{1} \rightarrow {}^{1}\mathrm{H}^{1} + e + \bar{\nu}$$

(Observe que las dos formas del decaimiento del neutrón indican la equivalencia de la destrucción de una antipartícula, el positrón, y la creación de la partícula asociada, el electrón. En la teoría de Dirac los procesos son idénticos). La reacción de Reines-Cowan tuvo lugar en el hidrógeno de un contador de centelleo de hidrógeno muy largo (una versión moderna del contador de ZnS de Rutherford, utilizando fotoceldas en vez de ojos para detectar los destellos luminosos). El contador se expuso al enorme flujo de antineutrinos emitidos en la fisión que induce decaimientos β en un reactor nuclear y los positrones se detectaron por los destellos que estos producían en el mismo contador. Se requirieron métodos elaborados para minimizar los destellos de fondo. Esto fue necesario porque sólo se obtenía aproximadamente una reacción por minuto, a pesar del intenso flujo de antineutrinos y del gran tamaño del blanco, debido a la debilidad de la interacción del decaimiento β.

Ahora se estudiará brevemente otros dos experimentos, realizados en la década de 1950, que informan sobre una propiedad única de la interacción β, Wu y colaboradores estudiaron el decaimiento

$${}^{27}\mathrm{Co}^{60} \rightarrow {}^{28}\mathrm{Ni}^{60} + e + \bar{\nu}$$

midiendo la dirección de emisión de los electrones con relación a la orientación de los momentos dipolares magnéticos de los núcleos de ${}^{27}\mathrm{Co}^{60}$ Los momentos dipolares magnéticos se alinearon utilizando un campo magnético externo muy intenso y una temperatura muy baja para minimizar el desorden térmico. La figura 16-15 es un dibujo esquemático del experimento

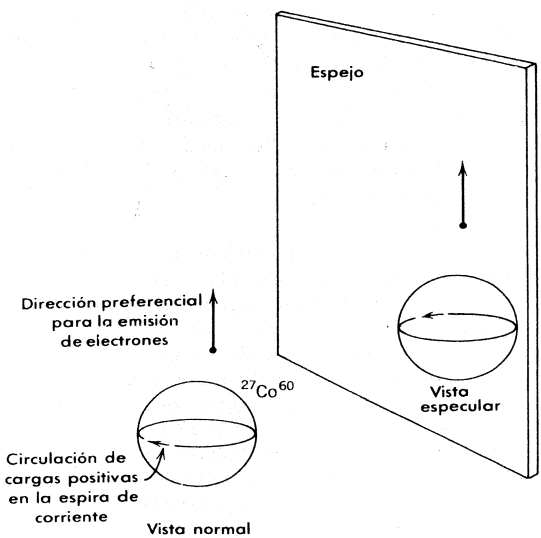


FIGURA 16-15
Dibujo esquemático del experimento con el que se demostró que en el decaimiento β no se conserva la paridad. También se muestra la imagen especular del experimento.

que muestra un núcleo típico y un electrón emitido. Para hacer el dibujo lo más real posible, se utilizó una espira de corriente de carga positiva para indicar la orientación del momento dipolar magnético. Wu encontró que los electrones no se emitían simétricamente respecto al plano de la espira de corriente. Por el contrario, existe una dirección preferida para corriente en la misma forma que la dirección de avance de un tornillo de rosca izquierda está relacionada con su rotación. La figura también muestra el experimento cuando se lo ve en un espejo. La dirección preferente de la emisión parece la misma, pero la circulación de la espira de corriente parece haberse invertido. Vistos en el espejo, los resultados del experimento están descritos diciendo que la relación entre la dirección del electrón típico y la circulación de la espira de corriente es como la de un tornillo de rosca derecha. Por lo tanto, *una descripción de éste decaimiento β (y otros) no es la misma que una descripción de la imagen especular.* Esta parece ser una propiedad única de la interacción del decaimiento β así como de todas las interacciones fundamentales de la naturaleza (nuclear , electromagnética, decaimiento β y gravitacional). Por ejemplo, las cargas que circulan en una espira de corriente macroscópica emiten fotones por la interacción electromagnética, ya que las cargas se están acelerando. Pero los fotones se emiten simétricamente respecto al plano de la espira, de modo que la descripción especular de éste proceso no puede diferir de la descripción normal. Ya que la operación de tomar una imagen especular está relacionada con la operación de paridad en la forma ilustrada en la figura 16-16, se dice que el decaimiento β no es invariante ante la operación de *paridad o que la paridad no se conserva en el decaimiento β (pero esto es en la interacción electromagnética).*

Mediciones de Goldhaber y colaboradores han mostrado que la llamada helicidad del antineutrino es la responsable de los resultados del experimento de Wu. Utilizando un método que es un poco complicado para explicarlo aquí, encontraron que en la visión normal de la naturaleza el impulso angular de spin de un antineutrino siempre está esencialmente paralelo a la dirección de su impulso lineal. Se dice que el antineutrino tiene la *helicidad* de un tornillo de rosca derecha, mostrado en la figura 16-17. También encontraron que el neutrino tiene la helicidad de un tornillo de rosca izquierda; es decir, su impulso angular de spin está esencialmente antiparalelo a su impulso lineal en la visión normal. Ahora bien, el decaimiento β estudiado por Wu está entre una $i = 5$, paridad par, estado base de $^{27}Co^{60}$, y una $i = 4$, paridad par, estado excitado de $^{28}Ni^{60}$. Por lo tanto, esta es una transición Gamow-Teller permitida en la cual la conservación del impulso angular exige que el antineutrino y el electrón se emitan con sus impulsos angulares de spin esencialmente paralelos al del $^{27}Co^{60}$, o a un vector que representa su momento magnético dipolar. Por lo tanto, en una transición como ésta el antineutrino y el electrón tienden a ser emitidos con vectores de impulso angular en direcciones opuestas. La figura 16-18 muestra la manera en que éstas relaciones entre los vectores más la relación de paralelismo entre los vectores de impulso lineal e impulso de spin del antineutrino demanda por su helicidad, causan que el electrón típico sea emitido en la dirección descrita. Vista en un espejo, la helicidad del antineutrino cambia del mismo modo como cambia la helicidad de un tornillo, lo cual conduce al cambio en la descripción de la imagen especular del experimento de Wu.

Nótese que en el decaimiento de $^{27}Co^{60}$ a $^{28}Ni^{60}$ no hay violación de la conservación de la paridad por parte de los núcleos. Ambos estados nucleares son de paridad par, de modo que no hay cambio en la paridad nuclear, en acuerdo con las reglas de selección de Gamow-Teller.

También habrá de observarse que para un antineutrino, o neutrino no es posible tener una helicidad definida en la visión normal de la naturaleza a menos que su masa en reposo sea precisamente cero. Si tuviera una masa en reposo diferente de cero, viajaría con velocidad menor que C y se podría encontrar siempre un sistema de referencia móvil en el cual su impulso lineal invirtiera su dirección. Como su spin no se invertiría por esa transformación, habría de invertirse su helicidad. Puesto que el experimento de Goldhaber muestra que los antineutrinos y los neutrinos tienen helicidades finitas y ya que esto no sería posible si sus helicidades dependieran del movimiento del sistema de referencia desde el que se les observa, se concluye que sus masas en reposo son precisamente cero. Mediciones directas de las masas en reposo de esta partícula confirman esta conclusión.

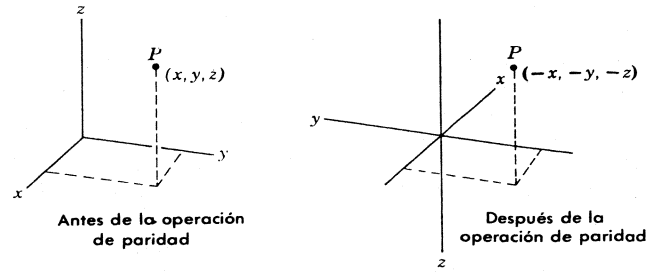


FIGURA 16-16

La operación de paridad $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$. En esta figura la operación se realizó invirtiendo la dirección de cada uno de los ejes coordenados, manteniendo fija la localización del punto representativo P (compárese con la figura 8-15). Antes de la operación se tenía un conjunto de ejes derecho, es decir, un tornillo de rosca derecha girando en el sentido que llevaría el eje x al eje y avanzaría en la dirección del eje z. Después de la operación se tiene un sistema izquierdo. Este cambio también se puede obtener por la operación de tomar la imagen especular, la cual convierte los ejes de un sistema derecho en los ejes de un sistema izquierdo. Asi, la operación de tomar la imagen especular está relacionada (pero no es idéntica) con la operación de paridad.

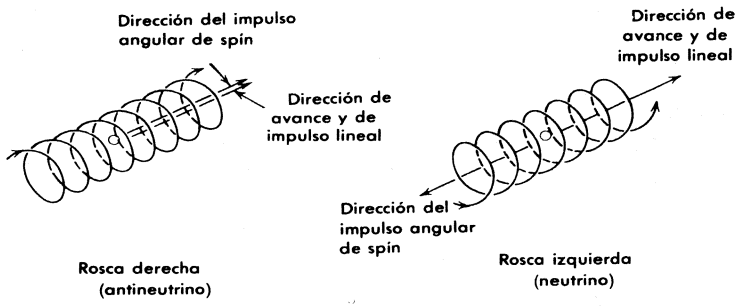
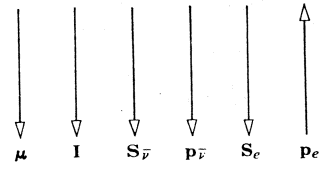


FIGURA 16-17

Las helicidades de una rosca derecha y de una rosca izquierda. .

FIGURA 16-18

Decaimiento β del $^{27}Co^{60}$. alineado. Los vectores dan sólo las direcciones de μ y $\mathbf{I}$, $\mathbf{S}_{\bar{\nu}}$ y $\mathbf{p}_{\bar{\nu}}$, y $\mathbf{S}_e$ y $\mathbf{p}_e$, que son el momento dipolar magnético nuclear y el spin, el spin del antineutrino y el impulso lineal y el spin del electrón y el impulso lineal. La paridad no se conserva porque $\mathbf{S}_{\bar{\nu}}$ y $\mathbf{p}_{\bar{\nu}}$ están esencialmente paralelos.



16.5 Decaimiento Gama

Hay rayos γ emitidos por la mayoría de los núcleos de las series radiactivas. Estos son los fotones de la radiación electromagnética que se llevan el exceso de energía cuando los núcleos realizan *decaimientos* γ desde los estados excitados hasta estados de menor energía. Como las diferencias en energía en el intervalo de estados nucleares excitados van más allá de $\sim 10^{-3}$ MeV, los rayos γ tienen energías mayores que $\sim 10^{-3}$ MeV (ver figura 2-4). Típicamente, el decaimiento γ aparecerá cuando un decaimiento β anterior ha producido alguno de los núcleos descendientes en estados de excitación de algunos MeV, ya que las reglas de selección de decaimiento β prevén que éste obedezca la tendencia, impuesta por la independencia en la energía, para transiciones que van abrumadoramente al estado base. En el esquema del decaimiento del $^{17}Cl^{38}$ en la figura 16-19 se muestra un ejemplo. Existen también muchas otras formas de producir núcleos en estados excitados que subsecuentemente decaen por γ. Por ejemplo, estados con energía de excitación alrededor de 7 u 8 MeV se producen cuando se libera una gran catidad de energía de enlace por la captura de un neutrón de baja energía en un núcleo.

La técnica más adecuada para medir la energía de los rayos γ es estudiar su difracción por una red cristalina de espaciamiento en la red conocida. Esta es exactamente la técnica de difracción de rayos X, pero puesto que los rayos γ tienen energías algo mayores que los rayos X, sus longitudes de onda son algo más cortas, lo cual obliga a utilizar aparatos de difracción de dimensiones inconvenientemente grandes para medir con precisión los ángulos de difracción

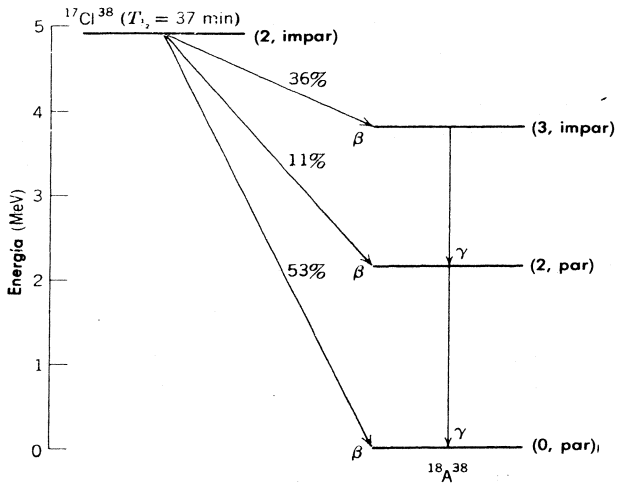


FIGURA 16-19

Esquema del decaimiento del $^{17}Cl^{38}$. Se muestran la vida media, el spin y la paridad del estado base de este núcleo inestable β también se muestra la energía del estado con relación al estado base del $^{18}A^{38}$. Asimismo, se muestran las energías, spin y paridades de los estados base y los dos primeros estados excitados del $^{18}A^{38}$, y las probabilidades relativas de que el decaimiento β lo lleve a alguno de estos estados. Cuando los estados excitados se pueblan, decaen por γ al estado base. El decaimiento al estado (3, impar) está permitido por las reglas de selección de Gamow-Teller mientras que los otros decaimientos β están prohibidos tanto por éstas como por las reglas de Fermi. Sin embargo, ocurren con probabilidad apreciable debido a la forma de la rapidez para todos los decaimientos, permitidos y prohibidos, aumentan rápidamente conforme aumenta la energía de decaimiento.

pequeños. La técnica más utilizada para medir las energías de los rayos γ aprovecha el que los fotones transfieran sus energías a los electrones mediante uno de los procesos descritos en el capítulo 2, ya sea, el efecto Compton, el efecto fotoeléctrico o la producción de pares. Las energías de los electrones se miden utilizando un contador de centelleo de NaI, o un contador de semiconductor, los cuales tienen una respuesta proporcional a la energía que una partícula cargada depositada en él. El espectro de energías medido de los rayos γ emitidos en transiciones entre los estados excitados de un núcleo se utiliza para determinar las energías de estos estados, de la misma manera como el espectro de fotones emitidos por un átomo se utiliza para determinar las energías de los estados atómicos. Por supuesto que esto proporciona información muy valiosa acerca del núcleo.

Otra fuente de información valiosa es la razón de transición R del decaimiento γ de cada uno de los estados excitados. En algunos casos se puede medir R directamente. En otros casos se puede obtener indirectamente midiendo el tiempo de vida T del estado. Si el estado sólo realiza una transición simple a un estado de menor energía, (16-4) nos dice $T = 1/R$ (después se hace la corrección para el proceso de "conversión interna" que se estudiará al final de esta sección). Cuando $T > 10^{-10}$ seg, esto se puede determinar midiendo electrónicamente el retraso promedio entre la excitación de un estado y su decaimiento. Cuando T es más pequeña que en esta figura, en algunos casos se puede determinar utilizando el efecto Mössbauer (que se estudiará en la siguiente sección) al determinar la banda de energía, o "ancho", del estado y entonces utilizar el principio de incertidumbre en energía—tiempo. Con esas técnicas distintas se ha observado que las razones o rapidez de transición van desde $R \sim 10^{-8}$ seg^{-1} hasta $R \sim 10^{18}$ seg^{-1}.

En una sección posterior se considerarán las energías de los estados excitados de los núcleos. Aquí considerarán sus velocidades de transición para decaimiento γ. Conforme se utilicen las ideas desarrolladas al tratar las transiciones ópticas de los átomos en la sección 8-7, evidentemente el estudiante habrá de revisar este material antes de proceder.

Para un átomo sólo es importante la radiación del dipolo eléctrico. Esta es la radiación producida por oscilaciones en su momento dipolar eléctrico. En principio, la radiación se puede emitir por un comportamiento más complicado de los electrones atómicos, tal como una oscilación del momento dipolar magnético o del momento cuadrupolar eléctrico. En la práctica, se puede ignorar esa radiación para un átomo, ya que la razón de transición es mucho más pequeña que para la radiación del dipolo eléctrico. Consideraciones electromagnéticas demuestran que la razón de transición para la radiación dipolar magnética deberá de ser menor que para la radiación dipolar eléctrica por un factor del orden de $(v/c)^2 \sim (10^{-2})^2 = 10^{-4}$, donde v es la velocidad típica de los electrones y c es la velocidad de la luz. Consideraciones geométricas, demuestran que la razón de transición para la radiación cuadrupolar eléctrica habrá de ser menor que para la radiación dipolar eléctrica por un factor del orden de $(r'/\lambda) \sim (10^{-10}\ \text{m}/10^{-7}\ \text{m})^2 = 10^{-6}$, donde r' y λ son valores típicos del radio atómico y de la longitud de onda de la radiación. Si las reglas de selección evitan que un átomo proveniente de la emisión de radiación de un dipolo eléctrico, éste es casi siempre desexcitado al golpear algún otro átomo antes de que pueda emitir radiación dipolar magnética o cuadrupolar eléctrica.

Para un núcleo los mismos factores suprimen las razones de transición para radiación dipolar magnética y cuadrupolar eléctrica, pero sus valores no son tan pequeños: $(v/c)^2 \sim (10^{-1})^2 = 10^{-2}$; $(r'/\lambda)^2 \sim (10^{-14}\ \text{m}/10^{-12}\ \text{m})^2 = 10^{-4}$. Además, la barrera de Coulomb protege a los núcleos de estar los suficientemente cerca como para que se desexciten entre ellos. Así, si las reglas de selección previenen a un núcleo con varios MeV de excitación de la radiación de dipolo eléctrico, éste *deberá* esperar hasta que pueda decaer por la emisión de alguna otra radiación electromagnética (o por el proceso relacionado de conversión interna).

Las razones de transición para varios tipos de radiación electromagnética se pueden calcular por extensiones del procedimiento desarrollado en la sección 8-7. Puesto que los cálculos son muy sensibles al comportamiento detallado de los núcleos en los estados involucrados en los decaimientos y puesto que los modelos nucleares sólo proporcionan descripciones aproximadas

de estos comportamientos, sólo se puede esperar que los resultados den una idea burda de la tendencia general. La tabla 16-1 muestra las razones de transición obtenidas por Weisskopf a partir de cálculos basados en el *módulo de capas* para un núcleo de radio $r' = 7$ F. El entero L marca la *multipolaridad* de las transiciones eléctrica y magnética; es 1 para dipolo, 2 para cuadrupolo, 3 para octupolo, etc. Observe que para rayos γ de 1 MeV las razones predichas para transiciones magnéticas son más pequeñas que para transiciones eléctricas de la misma L, por alrededor de $10^{-2} \sim (v/c)^2$. Para esta energía típica las razones predichas para ambos tipos de transiciones decrecen por aproximadamente $10^{-4} \sim (r'/\lambda)^2$, por cada unidad de incremento de L. Observe también que las razones de transición de dipolo tienen aproximadamente una dependencia $E^3 \propto \nu^3$ con la energía o con la frecuencia del rayo γ emitido. Anteriormente se ha visto ésta ν^3 dependencia en las razones de transición de dipolo eléctrico para átomos, (8-43). Ya que $(r'/\lambda)^2 \propto \nu^2 \propto E^2$, las razones de transición cuadrupolar dependen aproximadamente con E^5 y las transiciones octupolares dependen aproximadamente con E^7.

Los cálculos también muestran que las *reglas de selección para el decaimiento* γ *son:* Para *transiciones eléctricas*

$$|i_i - i_f| \leq L \leq i_i + i_f \qquad (\text{pero no } i_i = 0 \text{ a } i_f = 0)$$
La paridad nuclear deberá cambiar si L es impar y no deberá cambiar si L es par (16-23)

Para *transiciones magnéticas*

$$|i_i - i_f| \leq L \leq i_i + i_f \qquad (\text{pero no } i_i = 0 \text{ a } i_f = 0)$$
La paridad nuclear deberá cambiar si L es par y no deberá cambiar si L es impar (16-24)

En estas expresiones i_i es el spin nuclear del estado inicial, e i_f es el spin nuclear del estado final del núcleo que decae. Por supuesto que el decaimiento procederá siempre para las transiciones permitidas que tengan la mayor razón de transición. Debido a la fuerte dependencia de L de la razón de transición, se sigue que la *transición dominante tendrá* $L = |i_i - i_f|$. Si este valor de L es impar, habrá una transición eléctrica cuando los estados inicial y final sean de paridad opuesta, y una transición magnética cuando éstos estados sean de la misma paridad. Si éste valor de L es par, habrá una transición eléctrica cuando éstos estados sean de la misma paridad y una transición magnética cuando tengan paridad opuesta.

TABLA 16-1. Decaimiento Modelo de capas, rapidez de transición en seg^{-1} para un núcleo de radio $r' = 7F$.

Transición	L	γ Energía del rayo 10 MeV	1 MeV	0.1 MeV
Dipolo eléctrico	1	2×10^{18}	2×10^{15}	2×10^{12}
Dipolo magnético	1	2×10^{16}	2×10^{13}	2×10^{10}
Cuadrupolo eléctrico	2	1×10^{16}	1×10^{11}	1×10^{6}
Cuadrupolo magnético	2	1×10^{14}	1×10^{9}	1×10^{4}
Octupolo eléctrico	3	1×10^{13}	1×10^{6}	1×10^{-1}
Octupolo magnético	3	1×10^{11}	1×10^{4}	1×10^{-3}
Hexadecapolo eléctrico	4	1×10^{10}	1×10^{1}	1×10^{-8}
Hexadecapolo magnético	4	1×10^{8}	1×10^{-1}	1×10^{-10}

Ejemplo 16-6. Utilice la información en el diagrama del decaimiento de la figura 16-19 para determinar los tipos de radiación emitidos por $^{18}A^{38}$ en los decaimientos γ entre los tres estados de energía más bajos.

En el decaimiento entre los estados de $i = 3$, paridad par e $i = 2$, paridad par, se tiene $|i_i - i_f| = 1 = L$. Ya que este valor es impar y puesto que la paridad nuclear cambia, la radiación es dipolar eléctrica.

En el decaimiento entre los estados de $i = 2$, paridad par e $i = 0$, paridad par, se tiene $|i_i - i_f| = 2 = L$. Puesto que este valor es impar y ya que la paridad nuclear no cambia, la radiación es cuadrupolar eléctrica. ◀

Utilizando los argumentos del ejemplo 16-6 en la dirección opuesta, se puede obtener información acerca de los spin y paridades de los estados nucleares si se conocen los tipos de radiación emitida y las transiciones entre los estados. Los tipos de radiación se pueden identificar de mediciones aproximadas de las velocidades de transición (ó de mediciones de conversión interna que se describirán más adelante). Puesto que las razones de transición son muy sensitivas al cambio de los nucleones en el núcleo, sus mediciones precisas proporcionan información que se utiliza regularmente para mejorar los modelos nucleares. Las partes de las reglas de selección que relacionan L con los spin nucleares provienen del requisito de conservación del impulso angular en el decaimiento γ El estudiante puede verificar ésto con facilidad, si él acepta un resultado obtenido en la electrodinámica cuántica: un rayo γ emitido en una transición, de multipolaridad L lleva L unidad de impulso angular. (Ya que no es posible para un sistema de partículas tener un momento de monopolo eléctrico oscilante, o tener cualquier momento monopolar magnético, se sigue inmediatamente de este resultado que no existe modo de producir un rayo γ con $L = 0$ o un fotón con $L = 0$ en cualquier región del espectro electromagnético. De donde se observa la causa de que todos los fotones deberán llevar al menos una unidad de impulso angular).

Las partes de la regla de selección que relaciona L con las paridades nucleares provienen de las propiedades de simetría de los elementos de matriz para las transiciones. En el ejemplo 8-6 se vió que el elemento de matriz para el dipolo eléctrico se puede dividir en sus componentes, la primera de las cuales es

$$M \propto \int \psi_f^* x \psi_i \, d\tau \tag{16-25}$$

El factor x interviene debido a que es proporcional a la componente x del momento dipolar eléctrico. Los cálculos muestran que la primera componente del elemento de matriz del cuadrupolo eléctrico es

$$M \propto \int \psi_f^* x^2 \psi_i \, d\tau \tag{16-26}$$

El factor x^2 es proporcional a una de las componentes del momento cuadrupolar eléctrico. (Generalmente existen más de tres ya que por lo general un cuadrupolo estará descrito en términos de un tensor). Para el elemento de matriz del dipolo magnético, la primera componente resulta ser

$$M \propto \int \psi_f^* L_x \psi_i \, d\tau$$

donde L_x es la componente x del impulso angular orbital. Este factor interviene ya que es proporcional a la componente x del momento dipolar magnético (si por simplicidad, se supone que éste es puramente orbital). Ya que

$$L_x = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_x = yp_z - zp_y = m(yv_z - zv_y) = m\left(y\frac{dz}{dt} - z\frac{dy}{dt}\right)$$

La componente del elemento de matriz del dipolo magnético también se puede escribir

$$M \propto \int \psi_f^* \left(y \frac{dz}{dt} - z \frac{dy}{dt} \right) \psi_i \, d\tau \tag{16-27}$$

Al término de la sección 8-7 se probó que la integral en (16-25) resulta cero a menos que ψ_i y ψ_f tengan paridades opuestas. Se deja al estudiante el probar mediante argumentos similares que las integrales en 16-26 y 16-27 resultan cero a menos que ψ_i y ψ_f tengan las mismas paridades. Estos resultados son precisamente las reglas de selección de paridad para las tres transiciones que se tomaron como ejemplos.

En muchos de los decaimientos γ junto con los rayos γ se emiten varios grupos de electrones monoenergéticos. (Si existe un decaimiento β previo éstos grupos se superpondrán al espectro continuo del decaimiento β).Las energías $\mathscr{E}$ de éstos electrones resultan estar relacionadas con la energía E del decaimiento mediante la ecuación

$$\mathscr{E} = E - W \tag{16-28}$$

donde W para el grupo más prominente es igual a la energía de enlace de un electrón en la capa K del átomo que decae por γ y W para los otros grupos es igual a las energías de enlace de los electrones en las capas L, M, etc. Al proceso involucrado se le denomina *conversión interna.* Consiste de una transferencia de energía *directa* a través de la interacción electromagnética entre un núcleo en un estado excitado y uno de los electrones de su átomo. El núcleo decae a un estado más bajo sin producir un rayo γ. Pero, el decaimiento sigue siendo electromagnético, dependiendo de una interacción entre el electrón y la componente longitudinal del campo eléctrico producto, por el momento multipolar oscilante del núcleo. Las componentes transversales son las causantes del decaimiento γ (Véase apéndice B).

La figura 16-20 muestra los valores calculados para el *coeficiente de conversión interna* α_K, para el átomo ^{40}Zr Esta es la razón de la probabilidad de que un electrón K sea emitido en un decaimiento de su núcleo, a la probabilidad de que el emitido sea un rayo γ.Los cálculos deberán ser muy precisos puesto que los factores involucrados de las propiedades nucleares, que no son bien conocidos, se cancelan en la relación. Puesto que las oportunidades para la conversión interna crece rápidamente conforme el valor en el núcleo de la eigenfunción del electrón ligado aumenta, α_K rápidamente crece conforme la atracción de Coulomb crece al

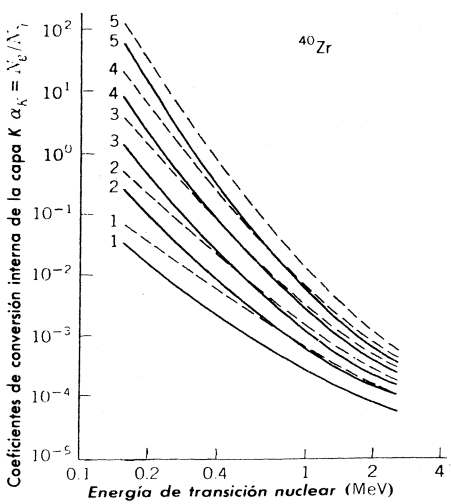


FIGURA 16-20
Coeficiente de conversión interna en la capa K para el ^{40}Zr. Las curvas continuas son para las transiciones eléctricas y las curvas discontinuas para transiciones magnéticas. Los números se refieren a la multipolaridad L.

aumentar Z. Por la misma razón, para Z y E dadas, la cantidade α_K es usualmente más grande que la cantidad α_L. Por lo tanto, para una Z y una E dadas, la cantidad α_K/α_L depende fuertemente del valor de L de la transición mediante el rayo γ y de si ésta es eléctrica o magnética. Mediciones precisas de α_K/α_L, que son relativamente fáciles de realizar, proporcionan un buen método de identificar el tipo de transición y de determinar de paso los spin y paridades relativas de los estados nucleares involucrados. La conversión interna no compete a la emisión de rayo γ en el sentido de que un proceso inhibe el otro. Los procesos son alternativas independientes, de modo que la rapidez total R_t para las transiciones entre los estados nucleares inicial y final es la suma

$$R_t = R + R_{ic} \tag{16-29}$$

donde R y R_{ic} son las velocidades (o rapidez) de transición para la emisión y para la conversión interna. Esto se puede escribir como

$$R_t = R + \alpha_t R = R(1 + \alpha_t)$$

donde $\alpha_t = \alpha_K + \alpha_L + \alpha_M + \cdots$ es el coeficiente de conversión total interno. Si el estado inicial puede decaer solamente a un estado final simple, como usualmente es cierto para tiempos de vida de decaimiento largos, entonces de (16-4)

$$T = \frac{1}{R_t} = \frac{1}{R(1 + \alpha_t)} \tag{16-30}$$

Entonces, los valores experimentales de los tiempos de vida T se pueden utilizar para obtener la rapidez de transición R ya que α_t se puede calcular con precisión. La figura 16-21 es una comparación de las velocidades de transición obtenidos de este modo y de las predicciones de los cálculos del modelo de capas para un grupo de transiciones que se han identificado como

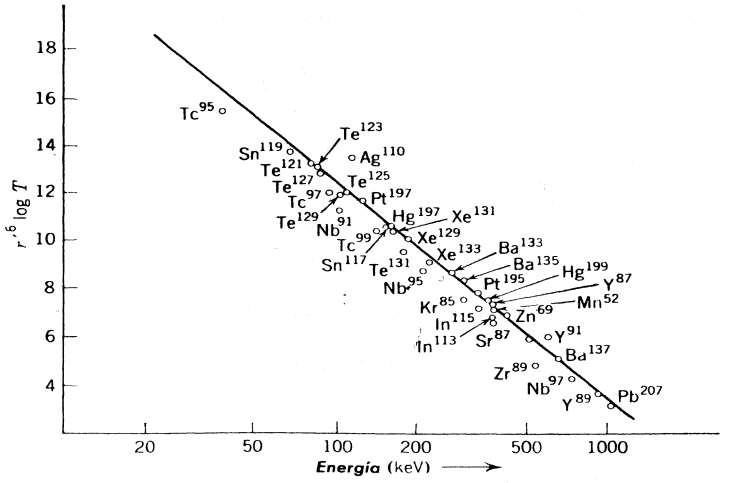


FIGURA 16-21

Tiempos de vida para un grupo de transiciones hexadecapolares magnéticas en decaimiento γ Se grafica el logaritmo de base 10 del producto del tiempo de vida T (en seg) y la sexta potencia del radio nuclear r' (en F) como una función de la energía del rayo γ *(en keV)*. Los puntos son experimentales y la recta es la predicción del modelo de capas.

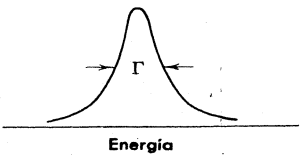


FIGURA 16-22
Anchura Γ de un estado excitado. En (16-32) se da una expresión matemática para la forma mostrada en esta figura.

hexadecapolar ($L = 4$, cambio de paridad). No hay concordancia. Una inspección al diagrama del modelo de capas de la figura 15-18 demostrará que todas éstas transiciones son entre estados muy próximos a aquellos que corresponden a los números mágicos. Así, aquí en donde los cálculos deberían ser óptimos. Para otras transiciones las predicciones del modelo de capas concuerdan muy poco con las mediciones. Pero en éstos casos se puede utilizar las predicciones del modelo colectivo para obtener una buena concordancia ya que el modelo colectivo puede describir adecuadamente las complicadas oscilaciones en la carga o corriente, distribuciones que son la causa de la emisión de radiación eléctrica o magnética.

El tiempo de vida de un estado excitado se expresa frecuentemente en términos de su ancho. De acuerdo con el principio de incertidumbre en la energía-tiempo si un núcleo promedio sobrevive en un estado excitado sólo por el tiempo de vida T del estado, entonces su energía en el estado se puede especificar dentro de un intervalo de energía Γ, satisfaciendo aproximadamente la relación

$$\Gamma = \frac{\hbar}{T} \tag{16-31}$$

Por lo tanto, los estados excitados no son perfectamente finos, por el contrario están diluídos sobre un intervalo de energía de *ancho* Γ. Un tratamiento detallado muestra que efectivamente 16-31 se satisface de una manera exacta, dado que es el ancho total a la mitad del máximo del perfil de energía del estado indicado en la figura 16-22.

Estimando la anchura de un estado típico que decae por γ de tiempo de vida $T \sim 10^{-10}$ seg. Se encuentra

$$\Gamma = \frac{\hbar}{T} \sim \frac{10^{-15}\ \text{eV-seg}}{10^{-10}\ \text{seg}} = 10^{-5}\ \text{eV}$$

En comparación con la energía típica $E = 1$ MeV para ese estado Γ es extremadamente pequeña. De hecho el valor pequeño de la razón

$$\frac{\Gamma}{E} \sim \frac{10^{-5}\ \text{eV}}{10^{6}\ \text{eV}} = 10^{-11}$$

explica la causa de que se haya despreciado las anchuras de los estados excitados con energía más baja en el decaimiento radiactivo. Cuando en las reacciones nucleares se consideren los estados excitados con mayor energía, se verá que algunos de ellos tienen anchuras muy grandes como para despreciarlas.

16.6 El Efecto Mössbauer

En 1958 un estudiante postgraduado de apellido Mössbauer hizo un descubrimiento que permite utilizar la extremadamente pequeña relación anchura a energía de los estados excitados bajos en muchas aplicaciones distintas como un espectrómetro de energía de resolución extremadamente buena. La idea básica del *efecto Mössbauer* está ilustrada en la figura 16-23. Un núcleo fuente en un estado excitado sufre una transición a su estado base emitiendo un rayo γ. El rayo γ es captado por un núcleo de absorción no excitado de la misma especie, el cual llega al mismo estado excitado. Las potencialidades como-

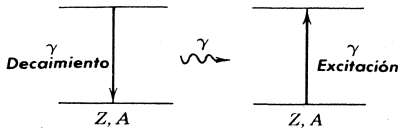


FIGURA 16-23
Absorción resonante, la base del efecto Mössbauer.

espectrómetro de energía resultan claras cuando se prueba que cambios en la energía de la fuente, en la energía del núcleo de absorción, o en la energía del rayo γ en vuelo, destruirá la absorción "resonante" ¡aún si el cambio en energía es de sólo unas cuantas partes en 10^{11}! . Por algunos años los físicos intentaron utilizar esta potencialidad pero con poco éxito. El problema era qué hacer con el retroceso de los núcleos en la emisión y absorción del rayo γ tal como se verá en el ejemplo siguiente.

Ejemplo 16-7. En los experimentos originales de absorción resonante realizados por Mössbauer utilizó los rayos gama emitidos en las transiciones del primer estado excitado de 0.129 MeV al estado base en el $^{77}Ir^{191}$. (a) Considérese el retroceso del núcleo cuando emite el rayo γ y determine el corrimiento hacia abajo en la energía del rayo γ que resulta de la energía que toma el retroceso nuclear. (b) A continuación compare este corrimiento en energía con la anchura del primer estado excitado del $^{77}Ir^{191}$, para el que se ha medido un tiempo de vida $T = 1.4 \times 10^{-10}$seg.

(a) Puesto que el impulso lineal total del núcleo que decae es cero antes de que emita el rayo γ la magnitud del impulso del retroceso del núcleo p_n después de la emisión deberá ser igual a la magnitud del impulso p_γ que lleva el rayo emitido. Como la masa nuclear M es grande, su velocidad del retroceso es baja, de modo que se puede utilizar la expresión clásica

$$p_n = \sqrt{2MK}$$

para relacionar p_n con la energía cinética K del retroceso nuclear. El impulso p_γ del rayo γ está relacionado con su energía E mediante su expresión relativista

$$p_\gamma = \frac{E}{c}$$

Por lo tanto, se tiene

$$p_\gamma = \frac{E}{c} = p_n = \sqrt{2MK}$$

o

$$\frac{E^2}{c^2} = 2MK$$

$$K = \frac{E^2}{2Mc^2}$$

Puesto que la suma de la energía E del rayo γ y de la energía de retroceso nuclear K deberá ser igual a la energía disponible en el decaimiento γ es decir, la energía 0.129 MeV del primer estado excitado del núcleo en cuestión, se ve que E es menor que la energía del primer estado excitado por una cantidad K. Este es el corrimiento hacia abajo ΔE en la energía del rayo γ debido al retroceso nuclear. Esto es

$$\Delta E = -K = -\frac{E^2}{2Mc^2}$$

debido a que M es tan grande ΔE es muy pequeña comparada con E y se habrá de evaluar de manera aproximada haciendo $E = 0.129$ MeV. Utilizando la relación 931 MeV $= uc^2$ para expresar la energía de masa nuclear en reposo Mc^2 en MeV, se tiene

$$\Delta E \simeq -\frac{(0.129)^2 \text{ MeV}^2}{2 \times 191 \times 931 \text{ MeV}} = -4.7 \times 10^{-8} \text{ MeV}$$

$$= -4.7 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

Se obtendría el mismo resultado considerando que el rayo γ se emite desde una fuente en movimiento, el núcleo, que retrocede, y utilizando la fórmula para el corrimiento Doppler longitudinal del ejemplo 2.7 con objeto de evaluar el corrimiento hacia abajo en su frecuencia o energía.

(b) Si el tiempo de vida del primer estado excitado del $^{77}Ir^{191}$ es $T = 1.4 \times 10^{-10}$ seg, su anchura

$$\Gamma = \frac{\hbar}{T} = \frac{6.6 \times 10^{-16}\ \text{eV-seg}}{1.4 \times 10^{-10}\ \text{seg}} = 4.7 \times 10^{-6}\ \text{eV}$$

Es evidente que el rayo γ emitido por el decaimiento del núcleo fuente $^{77}Ir^{191}$ desde el primer estado excitado no puede excitar un núcleo absorbedor $^{77}Ir^{191}$ desde su estado base a su primer estado excitado. El corrimiento de retroceso nuclear del rayo γ es mayor por un factor de 10^4 que la anchura del estado que se supone excita. Así el rayo γ está completamente fuera de resonancia y la absorción resonante se destruye (si en realidad hubiera absorción, habría en realidad dos fuentes del corrimiento total por retroceso. Una debido al retroceso del núcleo emisor y la otra debida al retroceso del núcleo de absorción. También habría dos fuentes de la anchura total de la resonancia, una debida a la anchura del espacio que emite el rayo γ y la otra debida a la anchura del estado que la absorbe). ◀

Mössbauer descubrió que es posible obtener absorción resonante si los núcleos fuente y de absorción están en cristales a temperaturas suficientemente bajas. En esas circunstancias, los cristales pueden retroceder como un todo con los núcleos emisor y colector o de absorción manteniéndose ligados a sus sitios en la red y no así las vibraciones de la red excitadas (fonones). Siendo tan extremadamente masivos, los cristales toman el impulso de retroceso necesario sin tomar una cantidad significativa de energía cinética. Mössbauer demostró la absorción resonante en la forma siguiente. Utilizando dos núcleos una fuente y un colector cristalino de $^{77}Ir^{191}$, y una temperatura de *88 K*, se las ingenió para que la fuente se moviera lentamente hacia adelante y hacia atrás a lo largo de la línea entre la fuente y el colector. Este movimiento produce corrimientos Doppler positivos y negativos en la frecuencia del rayo γ lo cual se traduce en cambios positivos y negativos extremadamente pequeños en su energía. Entonces, la energía del rayo γ varía hacia arriba y hacia abajo de la energía de resonancia que es la energía 0.129 MeV del primer estado excitado del $^{77}Ir^{191}$. La figura 16-24 muestra la curva de absorción que se describe conforme la energía del rayo γ se barre a través de la energía resonante. Su anchura total a la mitad del máximo es aproximadamente 10×10^{-6} eV. Esto concuerda bastante bien con la predicción de que debería ser dos veces la anchura Γ de los dos estados nucleares involucrados, ya que sus tiempos de vida medidos $T = 1.4 \times 10^{-10}$ seg. dan $\Gamma = 4.7 \times 10^{-6}$ eV. La concordancia también verifica 16-31 que se utilizó para calcular Γ a partir de T y, por lo tanto, verifica el principio de incertidumbre en energía-tiempo.

Mössbauer fue galardonado con el premio Nobel en 1961 debido a que su efecto le condujo a una gran variedad de mediciones de la energía extremadamente precisas. La mayor parte de los usos corrientes del efecto involucran mediciones de desdoblamientos hiperfinos muy pequeños de niveles de energía nucleares (no atómicos), desdoblamientos que provienen de las interacciones entre los momentos dipolar magné-

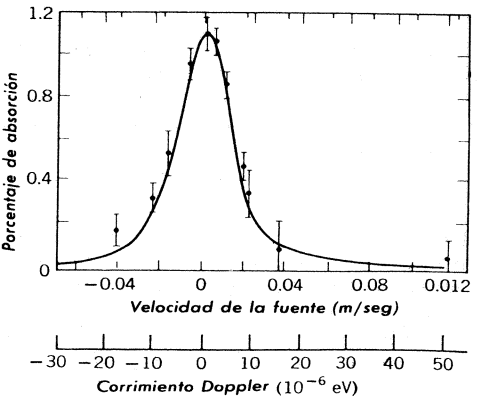


FIGURA 16-24
El efecto Mössbauer en $^{77}Ir^{191}$ a 88 K. Observe la velocidad extremadamente baja y el extremadamente pequeño corrimiento Doppler que es suficiente para eliminar la absorción resonante.

tico nuclear y cuadrupolar eléctrico y los campos eléctricos y magnético presentes en los sitios de la red cristalina. Los cambios en la energía de la fuente y/o del colector que representan los desdoblamientos, están determinados en términos del corrimiento Doppler requerido para regresarlo a la resonancia. Los físicos nucleares utilizan campos conocidos y miden los momentos. Los físicos del estado sólido miden los campos en los casos en los que se conocen los momentos y aún si los momentos no se conocen, de esta manera, pueden aprender mucho acerca de cómo varía el campo conforme la estructura cristalina cambia.

El efecto Mössbauer también se utiliza como espectrómetro de energía para medir cambios muy pequeños en las energías de los rayos γ debidos a fenómenos de la relatividad especial o general. Un ejemplo es la verificación del corrimiento gravitacional hacia el rojo de la relatividad general para los rayos en un espectrómetro Mössbauer de 22.5 m de alto orientado verticalmente. El corrimiento en energía fue solamente de alrededor de dos partes en 10^{15} pero fue medio mejorándolo en un poco más del 10%, y mostró dentro de ésta precisión una concordancia con las predicciones de la teoría de la relatividad general de Einstein. Los espectrómetros Mössbauer también se han utilizado para verificar el corrimiento Doppler transverso de la relatividad especial, así como las predicciones de la teoría concernientes con la "paradoja de los gemelos".

16-7 Reacciones nucleares

Ahora se pasa del decaimiento nuclear a las reacciones nucleares. Una razón importante por la cual se estudian las reacciones nucleares, es que éstas proporcionan información acerca de los estados excitados de los núcleos que complementa la información proporcionada por el estudio del decaimiento nuclear. Otras razones importantes aparecerán cuando se estudie la fisión y la fusión nuclear en las secciones subsecuentes. Y, por supuesto, el balance de energía en las reacciones nucleares se estudia con una justificación real, ya que éste informa de las masas de los participantes en las reacciones.

En el tratamiento del balance de energía en las reacciones nucleares en la sección 15-4, ya se ha considerado la aplicación de la energía relativista total, el impulso lineal y las leyes de conservación de la carga a los estados inicial y final de una reacción. A manera de resumen se enlistarán estas leyes de conservación así como otras que se aplican a cualquier reacción y entonces se aplicarán en un ejemplo. Las cantidades siguientes en cualquier reacción nuclear, se deben conservar: (1) *La energía relativista total,* (2) *el impulso lineal* (3) *el impulso angular,* (4) *la carga,* (5) *la paridad y* (6) *el número de nucleones.* En todas las reacciones que se estudiaron anteriormente se conservaba el número de nucleones, es decir, el número total de nucleones presentes antes de la reacción es igual al número total de nucleones presentes después de ella. Se encontró que esto es cierto para cualquier reacción nuclear. En la sección 15-4 no se consideró la conservación del impulso angular o la paridad porque éstas cantidades no afectan el balance de energía, pero afectan la rapidez, o secciones transversales para las reacciones tal como se indicará posteriormente. Es claro que el impulso angular deberá conservarse en una reacción nuclear. La paridad se conserva debido a que la interacción involucrada en una reacción nuclear es la paridad fuerte que se conserva en la interacción nuclear no la paridad débil que no se conserva en la interacción del decaimiento β.

Ejemplo 16-8. Cuando los protones de 50.0 MeV en el haz externo de un ciclotrón pegan sobre un blanco de berilio se encuentra que se emite un gran número de neutrones de alta energía. Los neutrones con mayor energía se emiten en la misma dirección que los protones incidentes y su energía es 48.1 MeV. Para aumentar el número de neutrones producidos, de modo que puedan utilizarse más fácilmente en otros experimentos se decide colocar el blanco de berilio dentro del ciclotrón donde será bombardeado por el haz interno más intenso. En esta configuración los neutrones producidos a 30º de la dirección de los protones de bombardeo tendrán un claro para pasar al exterior del ciclotrón. (a) Utilice las leyes de conservación para encontrar el núcleo residual en la reacción en la cual un protón $^1H^1$ es la partícula de bombardeo, un neutrón $^0n^1$ es la partícula de producto, y $^4Be^9$ es el núcleo blanco. (b) A continuación aplique las leyes de conservación para predecir los neutrones de máxima energía producidos a 30º de la dirección de los protones de bombardeo de 50.0 MeV.

(a) Las reacciones

$$^1H^1 + {}^4Be^9 \rightarrow {}^ZX^A + {}^0n^1$$

donde $^ZX^A$ representa el núcleo residual desconocido. La conservaicón de carga requiere que la suma de los valores Z en el primer miembro *izquierdo* de la fórmula de la reacción sea igual a la suma de los valores Z del segundo. Esto es

$$1 + 4 = Z + 0$$

o

$$Z = 5$$

La conservación del número de nucleones requiere que la suma de los valores A en el primer miembro sea igual a la suma de los valores A en el segundo miembro. Por lo tanto,

$$1 + 9 = A + 1$$

o

$$A = 9$$

De esta manera, se ha identificado al núcleo residual como $^5B^9$, y la reacción es

$$^1H^1 + {}^4Be^9 \rightarrow {}^5B^9 + {}^0n^1$$

(b) Para calcular las energías de los neutrones emitidos a distintos ángulos se utiliza la conservación de la energía relativista total y del impulso lineal, combinadas en la forma del valor Q(15-16)

$$Q = K_b\left(1 + \frac{m_b}{m_B}\right) - K_a\left(1 - \frac{m_a}{m_B}\right) - \frac{2}{m_B}(K_aK_bm_am_b)^{1/2}\cos\theta$$

donde K_a y m_a son la energía cinética y la masa del protón, K_b y m_b son la energía cinética y la masa del neutrón, m_B es la masa de $^5B^9$, y θ es el ángulo de emisión del neutrón con relación a la dirección del protón. Ya que siempre se trata con los neutrones de energía máxima emitidos, el valor Q siempre pertenece a una situación en la cual el núcleo residual está en su estado base.

Primero se determina el valor Q haciendo $K_a = 50.0$, $K_b = 48.1$, y $\theta = 0$, donde se utilizan MeV como unidad de energía. Ya que para una muy buena aproximación $m_a/m_B = m_b/m_B = 1/9$, se tiene

$$Q = 48.1 \times \frac{10}{9} - 50.0 \times \frac{8}{9} - 2\sqrt{50.0 \times 48.1 \times \frac{1}{9} \times \frac{1}{9}}$$

$$= 53.4 - 44.4 - 10.9 = -1.9$$

o

$$Q = -1.9 \text{ MeV}$$

Obsérvese que Q es justamente igual a $K_b - K_a$. Pero ésto solamente es cierto cuando $m_a = m_b$, $\theta = 0$, y $|Q|$ es pequeña comparado con K_a.

Conociendo el valor Q se encuentra K_b cuando $\theta = 30°$ utilizando nuevamente (15-16). Puesto que $\cos 30° = 0.866$ se tiene

$$-1.9 = K_b \times \frac{10}{9} - 50.0 \times \frac{8}{9} - \frac{2}{9}\sqrt{50.0} \times 0.866\sqrt{K_b}$$

Que se escribe como

$$1.11\left(\sqrt{K_b}\right)^2 - 1.36\sqrt{K_b} - 42.5 = 0$$

para hacerlo más fácil para aplicar la solución usual de una ecuación cuadrática en la incógnita $\sqrt{K_b}$. Esto resulta

$$\sqrt{K_b} = \frac{1.36 \pm \sqrt{(1.36)^2 + 4 \times 1.11 \times 42.5}}{2 \times 1.11} = \frac{1.36 \pm 13.79}{2.22}$$

La ecuación no es cuadrática en K_b, y sólo tiene una solución válida. Se puede mostrar fácilmente que ésta solución se obtiene para el signo más. Utilizando este signo se encuentra

$$\sqrt{K_b} = 6.82$$

o

$$K_b = 46.5$$

entonces el neutrón con máxima energía producido a 30° es

$$K_b = 46.5 \text{ MeV}$$ ◀

El material de las reacciones nucleares es mucho ya que existen muchos tipos diferentes de reacciones. Cualquier partícula nuclear estable puede ser la partícula de bombardeo; cualquier núcleo estable puede ser el núcleo blanco y una amplia variedad de partículas se pueden emitir en la reacción como partículas productos. El núcleo residual puede ser estable o radiactivo. Típicamente será estable si la reacción no cambia la relación Z -a - A del núcleo residual de la relación Z -a -A que tiene el núcleo blanco estable. Un ejemplo de una reacción que casi siempre conduce a un núcleo residual estable es (d,α), donde la notación significa que un deuterón, $^1H^2$, es la partícula de bombardeo y una partícula α $^2He^4$, es la partícula producto. Si la reacción disminuye de manera significativa la relación Z-a -A del núcleo residual, éste usualmente es radiactivo y decae por emisión de electrón para elevar su relación Z-a-A regresándola a un valor estable. Un ejemplo de una reacción que siempre lleva a un núcleo residual emisor de electrón es *(n, p)*, en la cual existe un neutrón como partícula de bombardeo y un protón como producto. Reacciones tales como *(p,n)* frecuentemente conducen a núcleos residuales radiactivos que son emisores de positrón o captores de electrón, ya que la reacción eleva la relación Z-a-A del núcleo residual sobre el valor estable que esta relación tiene para el núcleo blanco. Entonces, los reactores nucleares que producen flujos intensos de neutrones se utilizan con frecuencia para producir núcleos radiactivos para trabajo de diagnóstico en medicina y otros campos, como "trazadores" si los núcleos requeridos son emisores de electrón. Los ciclotrones que producen intensos flujos de protones o partículas con carga más elevada son usualmente las fuentes de los trazadores radiactivos que son emisores de positrón o captores de electrón.

En esta sección se presentaron ejemplos de los tipos más importantes de reacciones nucleares para estudiar los procesos que pueden ocurrir cuando protones de 50 MeV provenientes de un haz de un ciclotrón inciden sobre un núcleo blanco, de características promedio, contenido en una hoja colocada en el haz. Se describirá qué sucede *durante* estos procesos y no cuál es la situación antes y después, como se hizo en las primeras consideraciones del balance masa-energía en las relaciones nucleares.

Primero se dará un rápido resumen del proceso que puede ocurrir. El protón de energía representativa 50 MeV será dispersado desde el núcleo blanco por el *potencial de Coulomb*, a menos que ocurra que éste viaja casi en la dirección del centro nuclear. También puede ser dispersado por el *potencial nuclear*, si se acerca lo suficiente para sentir ese potencial. Si penetra en el núcleo probablemente choque con un nucleón en el núcleo después de viajar un poco a través de él. Si éste o el nucleón golpeado escapa de inmediato, en la llamada *interacción directa*, tomando la mayor parte de energía que lleva (como en la razón tratada en el ejemplo 16-8). Pero al menos uno de estos nucleones probablemente será reflejado hacia atrás en el núcleo por el cambio en el potencial nuclear en la superficie en la misma forma que una onda de luz sería reflejado internamente por un cambio en el indice de refracción. (Véase el análisis relacionado con 6-53). Este nucleón chocará con otro nucleón, cada uno de los cuáles sufrirá más presiones, etc. formando una cascada de colisiones. Tarde o temprano la energía se reparte en la excitación de muchos nucleones en lo que se llama el *núcleo compuesto*. En este punto, ningún nucleón es excitado lo suficiente para permitir que escapen sus $\sim$8 MeV de enlace del potencial nuclear. Después de algún tiempo una fluctuación en la energía repartida hará posible energéticamente el escape de

un nucleón. Esto sucederá si la reflexión interna en la superficie nuclear no hace necesario esperar para otra fluctuación. Eventualmente, varios nucleones se "evaporan" y sus energías de enlace son en gran parte las causas de remover la mayor parte de la energía de excitación del núcleo compuesto. Casi siempre, estos serán neutrones ya que la barrera de Coulomb actúa para retener a los protones. Cuando la energía de excitación está por debajo de la energía de enlace del neutrón el proceso de decaimiento γ relativamente lento lo supera y permite que el sistema alcance finalmente su estado base.

Se empezará un estudio más detallado de estos procesos apuntando que la longitud de onda de de Broglie de un protón de 50 MeV que se mueve a través de un potencial nuclear de profundidad de 50 MeV es $\simeq$ 3 F, y el alcance de las fuerzas nucleares es un poco más pequeño puesto que ambos son aproximadamente un tercio de un diámetro nuclear típico, en una primera aproximación burda se imaginará al protón como viajando en una trayectoria bien definida y sin que interactúe a distancia. Entonces el comportamiento del protón es como el de una bola de billar clásica. Esta aproximación también se aplica a los nucleones con los que choca el protón. Por supuesto, el aspecto ondulatorio de estas partículas hará correcciones importantes a la aproximación.

Ya que la *dispersión de Coulomb* se estudió bastante en el capítulo 4 y en el apéndice D, es poco lo que se necesita decir aquí, excepto comentar que la sección transversal de dispersión diferencial $d\sigma/d\Omega$ de (4-9) obtenida de la teoría clásica de Rutherford para la dispersión por un potencial de Coulomb es idéntica a la $d\sigma/d\Omega$ obtenida de la mecánica cuántica de este potencial. Esta situación es cierta sólo para un potencial que corresponde a una ley de fuerza inversa del cuadrado y aparece en la forma siguiente. Del análisis dimensional se puede demostrar que si la fuerza ejercida sobre una partícula varía de acuerdo con r^n, entonces la probabilidad de dispersión variará de acuerdo con h^{4+2n}. Para la ley inversa del cuadrado $n = -2$ la probabilidad de dispersión es independiente del valor de la constante de Planck h y requiere que la mecánica cuántica y los cálculos clásicos conduzcan al mismo resultado.

La figura 16-25 muestra la probabilidad de dispersión elástica (dispersión sin pérdida de energía excepto el retroceso del núcleo residual), como una función del ángulo de dispersión θ, para un protón incidente de 50 MeV sobre un núcleo típico. Para ángulos de dispersión pequeños la sección transversal diferencial sigue el decremento rápido pero suave proporcionado a 1 Sen^4 $(\theta/2)$ de la dispersión de Coulomb o Rutherford. La razón es que estos ángulos corresponden a colisiones en las cuales el protón pasa a través del potencial de Coulomb pero ignoran el potencial nuclear. Para ángulos de dispersión grandes la probabilidad de dispersión muestra una estructura del tipo de la difracción superpuesta con una tendencia decreciente continua. La razón es que los protones dispersados a estos ángulos realizan colisiones profundas como para que les afecte mucho el cambio brusco de potencial nuclear. La estructura de difracción de la llamada *dispersión por potencial nuclear* surge de las interferencias

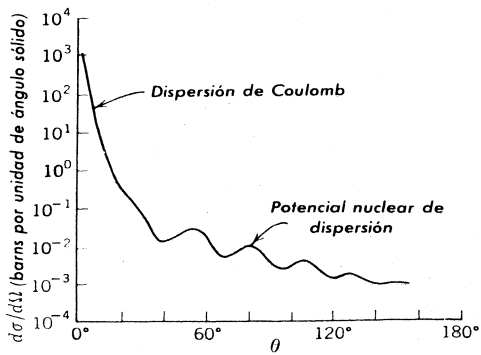


FIGURA 16-25
Sección transversal diferencial para la dispersión elástica de protones de 50 MeV a partir de un núcleo hipotético con propiedades típicas. La unidad de sección transversal es el barn; 1 bn = 10^{-24} cm^2.

entre las funciones de onda incidente y las distintas partes de la función de onda reflejada desde varias regiones del potencial nuclear.

Se puede utilizar un análisis mecánico cuántico de las medidas de dispersión elástica para determinar el potencial nuclear que actúa sobre el nucleón dispersado de alta energía. Se encuentra que el potencial es esencialmente el mismo que el potencial del modelo de capas que actúa sobre un nucleón en el estado base del núcleo proyectil con una excepción importante. El potencial que actúa sobre un nucleón no ligado, llamado potencial del modelo óptico es parcialmente *absorbente*. La absorción representa el hecho que un nucleón como éste tiene energía suficiente para chocar con un nucleón en el núcleo y entonces ser absorbido del haz incidente. (Es absorbido en el sentido de que deja de tener la misma energía, o longitud de onda de de Broglie, de modo que no puede haber interferencia entre su función de onda y la función de onda para el nucleón incidente). Las colisiones son posibles ya que el principio de exclusión no tiene su efecto inhibidor usual si el nucleón incidente tiene suficiente energía, de modo que tanto él como el nucleón golpeado puedan ocupar fácilmente estados no llenos. Por supuesto, el nucleón también incidente puede ser dispersado por la parte más conocida no absorbente del potencial. (Esto es, también puede interactuar con el núcleo como un todo representado por el potencial atractivo usual sin chocar con un nucleón individual del núcleo). El modelo óptico es esencialmente una generalización del modelo de capas aplicable a nucleones de cualquier energía no sólo a nucleones de energía tal que estén ligados en un núcleo.

Si se mide la probabilidad de dispersión como una función de la energía de la partícula incidente, algunas veces se ven a ciertas energías máximas muy anchas. Estas se llaman *resonancias por tamaño o estados de partícula simple*. Como lo implican ambos nombres pueden imaginarse en dos formas distintas: (1) interferencias constructivas entre la parte de la función de onda de la partícula diferente dispersada desde la superficie frontal del potencial nuclear y la parte dispersada por la parte de atrás; (2) niveles de energía de la partícula incidente en el potencial nuclear. El primer punto de vista está relacionado con un desarrollo en el análisis del efecto Ramsauer en la sección 6-5, pero aquí se encontrará el segundo punto de vista que es más útil. Los máximos son anchos porque los estados de partícula simple son muy anchos. Si se evalúa el tiempo requerido para que un nucleón de 50 MeV viaje un diámetro nuclear típico, se encuentra $T = D/v \sim 10^{-14}\ \text{m}/10^{8}\ \text{m-seg}^{-1} = 10^{-22}$ seg. Ya que este tiempo también caracteriza la duración del proceso de dispersión por el potencial nuclear, o el tiempo de vida de la partícula en el estado de partícula simple, la anchura Γ del estado es típicamente $\Gamma = \hbar/T \sim 10^{-15}\ \text{eV-seg}/10^{-22}\text{seg} = 10^{7}\ \text{eV} = 10\ \text{MeV}$. Observe que la anchura de un estado de partícula simple de alta energía es aproximadamente 12 órdenes de magnitud mayor que la anchura de un estado de decaimiento γ de baja energía típica considerado al final de la sección 16-5.

Reconsiderando ahora las colisiones entre el protón incidente y los nucleones del núcleo. Antes de chocar, el impulso lineal del protón está aproximadamente en la dirección del haz y es de mucho mayor magnitud que el de cualquier nucleón en el núcleo. La conservación del impulso lineal requiere entonces que después de la primera colisión ambos nucleones tiendan a moverse en la dirección general del haz y esto es particularmente así para un nucleón, si ocurre que éste lleva la mayor parte del impulso incidente o de la energía. Un nucleón de alta energía es el más viable a escapar a reflexiones internas en la superficie nuclear y ser emitido en lo que se llama una interacción directa. Conservará su tendencia a moverse en la dirección general del haz incidente aún cuando se ha refractado al pasar a través de la superficie.

La figura 16-26 muestra el espectro de protones de alta energía emitidos a algún ángulo fijo desde un núcleo típico. El grupo de energía más alta contiene a los protones *dispersados elásticamente*. Estos tienen la misma energía que los protones incidentes (excepto por la pequeña cantidad de energía que se pierde en el retroceso del núcleo residual) y son el resultado de la dispersión por potencial de Coulomb y potencial nuclear. El grupo siguiente en la energía más alta contiene a los protones *dispersados inelásticamente* que provienen de interacciones directas. Cuando en este grupo se emite un protón, el grupo residual permanece en su primer

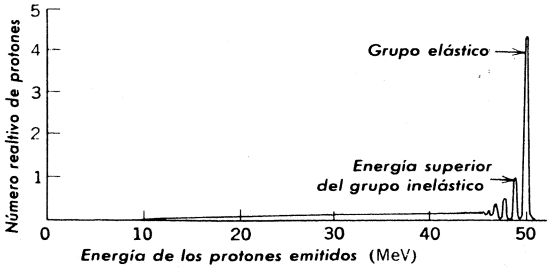


FIGURA 16-26
Espectro de energía de protones emitidos a un ángulo cuando los protones de 50 MeV inciden sobre un núcleo hipotético de propiedades típicas. Los niveles de energía bajos del núcleo residual aparecen en los grupos inelásticos de alta energía. Estos niveles se funden en un continuo, como lo hace el espectro inelástico. El corte en el espectro alrededor de los 10 MeV representa los efectos de la reflexión interna y de la barrera de Coulomb que evita el escape de protones.

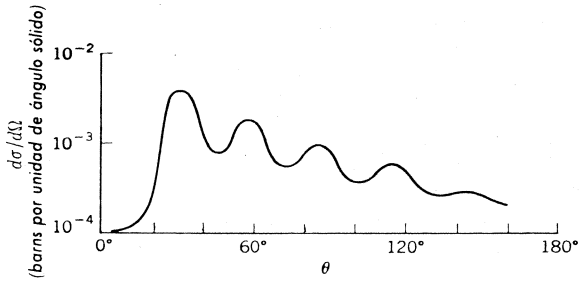


FIGURA 16-27
Sección transversal diferencial $d\sigma/d\Omega$ para el grupo de energía más alta en la dispersión inelástica de protones de 50 MeV por un núcleo hipotético con propiedades típicas. La preferencia general para ángulos frontales de emisión es característica del proceso de interacción directa, pero $d\sigma/d\Omega$ se suprime a ángulos muy pequeños si el impulso angular orbital se transfiere al núcleo en la reacción. La figura representa $d\sigma/d\Omega$ para una reacción en la cual el estado excitado tiene impulso angular orbital una unidad mayor que el estado base.

estado excitado. Cuando se emite un protón en el grupo siguiente de menor energía, este núcleo está en su segundo estado excitado, etc. entonces *el espectro de energía da de inmediato la localización de los estados excitados del núcleo.*

La tendencia general para ángulos de emisión pequeños de los nucleones de alta energía que provienen de interacciones directas se muestra en la figura 16-27. Esta representa la sección transversal diferencial $d\sigma/d\Omega$ para los protones emitidos en el grupo dispersado inelásticamente con la más alta energía, para el caso típico de la figura anterior. En la figura también está indicada la tendencia para que $d\sigma/d\Omega$ se suprima a ángulos muy pequeños, si el impulso angular orbital se transfiere al núcleo desde el protón incidente en la reacción debido a que al estar excitado tiene un impulso angular orbital distinto al del estado base. El argumento semiclásico de la figura 16-28 muestra que esta tendencia refleja el hecho de que es difícil para una partícula, que sólo experimenta un pequeño decremento en la magnitud de su impulso angular durante la interacción con un proyectil de radio restringido, transferir el impulso

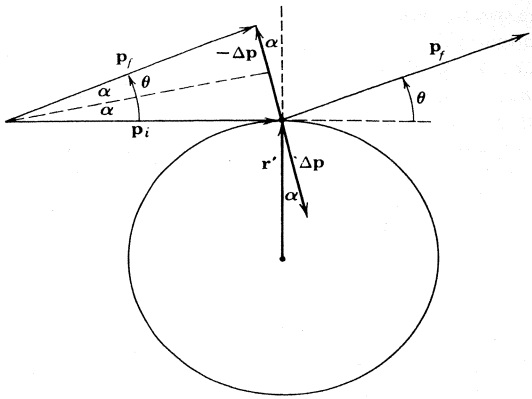


FIGURA 16-28
Ilustración de la relación entre los impulsos lineal y angular orbital transferido a un núcleo en una interacción directa con dispersión inelástica que lo lleva a su primer estado excitado. El impulso lineal del núcleo incidente es $\mathbf{p}_i$ que deja al núcleo a un ángulo θ con el impulso lineal $\mathbf{p}_f$ Puesto que este se emite con casi toda la energía que tenía cuando incidió, $p_f \simeq p_i \simeq p$, y el impulso $\Delta\mathbf{p} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f$ se transfiere al núcleo principalmente ya que la dirección de $\mathbf{p}_f$ difiere de la dirección de $\mathbf{p}_i$. La figura muestra la interacción que ocurre cerca de la periferia del núcleo de radio r' donde será más efectivo para transferir el impulso angular $\Delta\mathbf{L}$ al núcleo. Puesto que $\Delta\mathbf{L} = \mathbf{r}' \times \Delta\mathbf{p}$, se tiene $\Delta L = r' \Delta p$ sen $\alpha \simeq r' \Delta p\alpha$, ya que el ángulo $\alpha = \theta/2$ definido en la figura tiende a ser pequeño en una interacción directa. La figura muestra que $\Delta p \simeq 2p_i\alpha \simeq 2p\alpha$. Así, $\Delta L \simeq 2r' p\alpha^2$. Para un caso en el cual se le da al núcleo una unidad de impulso angular orbital, se tiene

$$\Delta L = \sqrt{1(1+1)}\,\hbar = 1.4\hbar$$

Entonces se obtiene $\alpha^2 \simeq 1.4\hbar/2r'p = 1.4\hbar/2r'(h/\lambda) = 1.4/4\pi(r'/\lambda)$ donde λ es la longitud de onda de de Broglie del protón. Como se indica en el texto $r'/\lambda \simeq 5/3$ para un protón de 50 MeV que se mueve a través de un pozo potencial de 50 MeV de un núcleo típico de radio $r' = 5$ F. Así

$$\alpha^2 \simeq 1.4/4\pi(5/3) \simeq 6 \times 10^{-2}$$

o $\alpha \simeq 2.5 \times 10^{-1}$ rad $\simeq 15°$. Entonces el ángulo de emisión que predicen los cálculos semiclásicos que llevarían a una transferencia de una unidad de impulso angular orbital es $\theta = 2\alpha \simeq 30°$. Para ángulos mucho más pequeños que éste no sería posible la reacción. Si se transfiriera un impulso angular orbital aún mayor al núcleo, se requiriría un ángulo de emisión mayor, debido a la diferencia entre los spin de su estado base y los primeros estados excitados.

angular orbital al proyectil a menos que éste cambie su dirección de movimiento lo suficiente para producir un cambio notable en el vector que describe su impulso lineal.

Por supuesto que el argumento de las bolas de billar que predice la tendencia general falla al predecir las oscilaciones a su alrededor que se observan en la figura 16-27. Estas provienen de interferencias entre partes de la función de onda del nucleón emitido que se originan en diferentes regiones del núcleo. La estructura de la curva de la sección transversal diferencial se puede analizar para obtener información acerca del spin nuclear y de la paridad del estado del núcleo residual que se excita en la emisión del grupo dispersado inelásticamente. Los procedimientos

utilizados en el análisis son un poco complicados para introducirlos aquí pero se dirá que estos confirman que *en la interacción nuclear la paridad se conserva.*

A pesar de que un protón incidente tiene alrededor de 90% de oportunidad de realizar una colisión con un nucleón al atravesar el núcleo, en sólo 10% de éstos eventos habrá una interacción directa con el nucleón emitido. Usualmente tanto el protón incidente como el nucleón al que le pega son atrapados en el núcleo por reflexiones internas. En aproximadamente 1% de los eventos con el nucleón golpeado escapan. Si se miden sus impulsos lineales se puede obtener información valiosa acerca del impulso inicial del nucleón golpeado cuando éste estaba en el núcleo (después de corregir por refracción y absorción conforme los protones dejan el potencial óptico nuclear). Recientemente ésta ha venido a ser una técnica de investigación importante en la física nuclear.

El tiempo requerido para la primera colisión es $\sim 10^{-22}$ seg., ya que ésta es bastante grande como lo que le toma a un nucleón de velocidad típica el viajar una distancia igual a un diámetro nuclear típico. Los pasos siguientes en la cascada de colisiones ocurren a intervalos de tiempo aproximadamente iguales. En los primeros dos o tres pasos existe una oportunidad de que uno de los nucleones que han chocado escape pero la oportunidad disminuye rápidamente porque las colisiones conducen a un fraccionamiento de la energía. Reflexiones internas en el potencial nuclear aparecen conforme decrecen las energías de los nucleones individuales y tarde o temprano aparecen inhibiciones más fuertes debido a que las energías de excitación de los nucleones se hacen menores que sus energías de enlace. Después de algo así como 10 pasos de la cascada, lo cual toma $\sim 10^{-21}$ seg., la energía está bien distribuída sobre todos los nucleones del núcleo. Ninguno de estos nucleones tiene energía suficiente para escapar y entonces intercambian energía en una especie de equilibrio térmico. A éste sistema en equilibrio se le llama el *núcleo compuesto.*

Puesto que el sistema, en equilibrio no contiene un número muy grande de partículas ($A \sim 100$), ocasionalmente ocurren fluctuaciones grandes en la distribución de la energía. Si algún nucleón acumula alrededor de diez veces más de la energía de excitación promedio, tendría el equivalente de su energía de enlace y podría escapar. Típicamente, esto toma alrededor de 10^{-16} seg y típicamente el nucleón no lo logra porque es reflejado internamente. Pero eventualmente escapará un nucleón llevando un poco más de su energía de enlace. En promedio, el tiempo transcurrido para esto es alrededor de 10^{-15} seg. Después de que han escapado varios nucleones no queda energía de excitación suficiente en el núcleo para proporcionar los ~ 8 MeV requeridos para emitir otro nucleón. Como se ha mencionado el decaimiento γ se utiliza para disipar los pocos MeV finales de la energía de excitación y como también se mencionó casi todos los nucleones que se escaparon en las fluctuaciones sobre el equilibrio son neutrones. Los protones generalmente no pueden acumular energía suficiente como para vencer la barrera de Coulomb que actúa sobre ellos.

En un núcleo compuesto la excitación se distribuye sobre muchas partículas. Consecuentemente, a los estados excitados del núcleo se les denomina *estados de muchas partículas.* En contraste con los estados de partícula simple que son muy anchos, los estados de muchas partículas son muy angostos. Puesto que al núcleo compuesto le toma $T \sim 10^{-15}$ seg en decaer por emisión de neutrón, el ancho Γ típico para uno de estos estados está dado en términos del tiempo de vida por

$$\Gamma = \hbar/T \sim 10^{-15}\ \text{eV-seg}/10^{-15}\ \text{eV} = 1\ \text{eV}$$

Estos estados angostos se pueden observar midiendo la probabilidad de que un nucleón incidente forme un núcleo compuesto o sección transversal total definida en (2-18) como función de la energía del nucleón. Como la separación entre los estados de muchas partículas decrece rápidamente y sus anchos aumentan con el aumento de la energía de excitación, es más fácil verlos si se utiliza un núcleo incidente con la energía más baja posible. La figura (16-29) es un ejemplo de los estados de muchas partículas, o *resonancias de núcleos compuestos,* observados cuando sobre un núcleo típico inciden neutrones de energía muy baja.

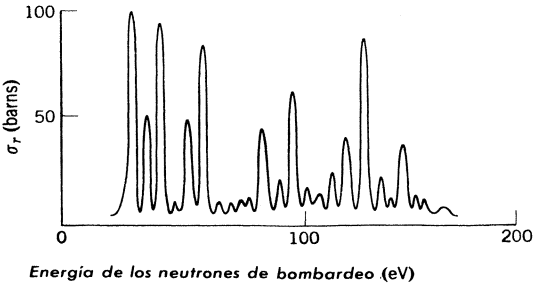


FIGURA 16-29
Sección transversal total para un neutrón incidente de energía muy baja que sigue cualquier reacción distinta de la dispersión elastica con un núcleo hipotético de propiedades típicas. Los estados de muchas partículas del núcleo compuesto de energía de excitación de alrededor de 8 MeV (la energía de enlace traída por el neutrón incidente) se ve directamente en tales datos.

En la figura 16-29 la forma de cualquier sección transversal de resonancia individual, está dada por la *fórmula de Breit-Wigner*

$$\sigma_r(E) = \pi(\lambda/2\pi)^2 \frac{\Gamma_n \Gamma_r}{(E - E_i)^2 + \Gamma/4} \tag{16-32}$$

donde la sección transversal total de la reacción $\sigma_r(E)$ es la sección transversal para la formación de un núcleo compuesto que decae por cualesquier otro proceso distinto de la emisión de un neutrón de la misma energía que el incidente; E es la energía para este neutrón y λ es la longitud de onda de de Broglie correspondiente; E_i es la energía de resonancia; Γ es el ancho total a la mitad del máximo de la resonancia y Γ_n, o Γ_r, es Γ veces la razón de la probabilidad de decaimiento del núcleo compuesto mediante emisión de un neutrón de la misma energía que el neutrón incide o cualesquier otro proceso, a la probabilidad de decaimiento mediante todos los procesos. La misma fórmula, con Γ_r substituída por Γ_n, proporciona la sección transversal total para la formación de un núcleo compuesto que decae subsecuentemente por la emisión de un neutrón de la misma energía que el neutrón incidente, es decir, la sección transversal σ_s (E) de dispersión elástica del núcleo compuesto. Una fórmula similar describe la forma de las resonancias del rayo γ en las figuras 16-22 y 16-24. De hecho, se encuentra la misma forma básica para la curva de resonancia en cualquier tipo de onda amortiguada o movimiento oscilatorio. El estudiante habrá visto una derivación de esto en el caso de un péndulo amortiguado o un circuito resistivo resonante.

Un caso muy interesante (16-32) que es particular al caso de resonancia de neutrón de baja energía es el factor $\pi(\lambda/2\pi)^2$, que determina el valor máximo posible de las reacciones transversales totales de neutrón en el pico de una resonancia. Esta es el área de un círculo de radio igual a la longitud de onda de de Broglie del neutrón λ dividida entre 2π, y no el área de un círculo de radio nuclear r'. Ya que $\lambda \gg r'$ para neutrones de energía suficientemente baja, la sección transversal total de la reacción o de la dispersión en el pico de resonancia puede ser mucho más grande que la sección transversal geométrica proyectada $\pi r'^2$, del núcleo. Esto es posible porque el neutrón de baja energía actúa como una onda, no como partícula clásica, y en resonancia puede interactuar con el núcleo blanco siempre que el valor de expectación de su posición pase dentro de una distancia de alrededor $\lambda/2\pi$ del núcleo. Posteriormente, se verá que esta propiedad es muy importante en la operación de un reactor nuclear.

Otra característica de un núcleo compuesto es que en su relativamente grande tiempo de vida se olvidan los detalles de como se formó. Por ejemplo, puesto que el impulso lineal original de la partícula incidente se distribuye entre las muchas partículas que se excitan en el núcleo compuesto, no puede haber para los neutrones una preferencia para emitirlos en dirección del haz. La figura 16-30 muestra un ejemplo de la sección transversal diferencial isotrópica para la emisión que caracteriza a los neutrones de baja energía que se producen en las reacciones nucleares. Estos son los neutrones que se evaporan de los núcleos compuestos.

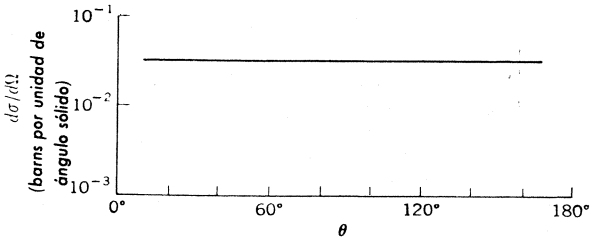


FIGURA 16-30
Sección transversal diferencial para la evaporación del núcleo compuesto de neutrones de baja energía que siguen al bombardeo de 50 MeV de un núcleo hipotético de propiedades típicas. La ausencia de una dirección preferente para la emisión es característica del proceso del núcleo compuesto.

Ejemplo 16-9. La sección transversal diferencial pedida para la emisión a 40° del grupo de protones dispersados inelásticamente con la mayor energía al bombardear $^{26}Fe^{54}$ con protones de 60 MeV es $d\sigma/d\Omega = 1.3 \times 10^{-3}$ bn por unidad de ángulo sólido. Estos protones inelásticos dejan el núcleo residual $^{26}Fe^{54}$ en su primer estado excitado a 1.42 MeV. Calcular cuántos eventos por segundo se registran en una medición de los protones dispersados inelásticamente, si el detector con área de 10^{-5} m^2 está localizado a 10^{-1} m de una hoja de $^{26}Fe^{54}$ puro, de masa por unidad de área 10^{-1} kg/m^2, que es bombardeado por un haz de protones de 10^{-7}. (En física nuclear a la unidad de área para secciones transversales se le denomina *barn* y se escribe bn; 1 bn $= 10^{-28}$ m^2.)

El número n de núcleos, o átomos, contenidos en una área unitaria del blanco es la msa por unidad de área del blanco dividido entre la masa de un átomo de $^{26}Fe^{54}$ Ya que esto es casi exactamente 54 veces la masa de un átomo de $^{1}H^{1}$ se tiene

$$n = \frac{10^{-1}\ \text{kg/m}^2}{54 \times 1.66 \times 10^{-27}\ \text{kg/núcleo}} = 1.1 \times 10^{24}\ \text{núcleos/m}^2$$

El ángulo sólido $d\Omega$ subtendido por el detector desde el blanco es un área dividida por el cuadrado de su distancia hasta el blanco. Así

$$d\Omega = \frac{10^{-5}\ \text{m}^2}{(10^{-1}\ \text{m})^2} = 10^{-3}\ \text{sr}$$

(la unidad de ángulo sólido se llama *estereoradian*, se escribe sr y sr = ángulo sólido subtendido por 1 m^2 a una distancia de 1 m).

El producto de la sección transversal diferencial $d\sigma/d\Omega$ para los eventos de interés y el ángulo sólido $d\Omega$ subtendido por el detector da un área por núcleo que es efectiva para detectar los eventos. Esta área efectiva por núcleo $d\sigma$ es

$$d\sigma = 1.3 \times 10^{-3}\ \frac{\text{bn/sr}}{\text{núcleo}} \times 10^{-3}\ \text{sr} = 1.3 \times 10^{-6}\ \text{bn/núcleo} = 1.3 \times 10^{-34}\ \text{m}^2/\text{núcleo}$$

El producto del área efectiva por núcleo, $d\sigma$, el número de núcleos por unidad de área, n, es igual a la probabilidad de que un protón incidente produzca un evento detectable. Esta probabilidad P es

$$P = d\sigma\, n = 1.3 \times 10^{-34}\ \text{m}^2/\text{núcleo} \times 1.1 \times 10^{24}\ \text{núcleo/m}^2 = 1.4 \times 10^{-10}$$

Esto es

$$P = 1.4 \times 10^{-10}\ \text{evento/protón}$$

El número de protones por segundo I en el haz incidente es la carga por segundo en el haz dividida entre la carga por protón, o

$$I = \frac{10^{-7}\ \text{coul/seg}}{1.6 \times 10^{-19}\ \text{coul/protón}} = 6.2 \times 10^{11}\ \text{protón/seg}$$

Multiplicando el número de protones por segundo I por la probabilidad P de que un protón produzca un evento detectable, se obtiene el número de eventos detectados por segundo. Esto es

$$dN = IP = 6.2 \times 10^{11}\ \text{protón/seg} \times 1.4 \times 10^{-10}\ \text{evento/protón} = 87\ \text{eventos/seg}$$

Obsérvese que la ecuación anterior se puede escribir como

$$dN = IP = I\, d\sigma\, n = \frac{d\sigma}{d\Omega}\, In\, d\Omega$$

en acuerdo con (4-8) que es la definición de sección transversal diferencial. ◀

16.8 Estados excitados de los núcleos

La figura 16-31 resume la información sobre los estados excitados de los núcleos, obtenida del estudio de los decaimientos y reacciones nucleares. El diagrama de niveles de energía representa los estados de energía del núcleo completo y *no* de los nucleones individuales en el núcleo. Hasta una excitación de $\sim$8 MeV los estados decaen por γ al estado base. Por encima de $\sim$ 8 MeV la emisión de nucleón se hace energéticamente posible y este proceso rápidamente se convierte en el modo de decaimiento dominante ya que tiene un tiempo de vida mucho más corto o una rapidez de transición mucho más alta. Esta es la región de los estados de muchas partículas. Estos están muy compactados porque existen un gran número de divisiones diferentes de la energía entre las muchas partículas del núcleo que conducen a casi la misma energía de excitación nuclear total. El espaciamiento decrece conforme A aumenta debido a que son posibles más divisiones. También decrece conforme hay más energía de excitación disponible para dividirse entre las partículas. Entonces, los estados de muchas partículas se funden rápidamente en un continuo de estados de energía nuclear permitidos, pero el continuo conserva cierta estructura ya que los estados de muchas partículas tienden a agruparse en los estados de una sola partícula que son muy anchos y a través de los cuales han sido excitados. Cada uno de los estados de muchas partículas en un grupo tienen el mismo impulso angular y paridad que el estado de una sola partícula original.

Ahora se verán más cuidadosamente los estados excitados *bajos*. El caso más simple es el de un núcleo cuyo estado base consiste de un núcleo de subcapas con números mágicos llenos más un nucleón. En el primer estado excitado, el nucleón extra brinca a la subcapa siguiente con mayor energía y el núcleo permanece imperturbado. La figura 16-32 muestra, como ejemplo, los estados excitados bajos del $^{8}O^{17}$ el spin y paridad del primer estado excitado concuerda con las predicciones de la figura 15-18 del modelo de capas, pero su energía no está predicha por el modelo. Si el estado base de un núcleo consiste de un núcleo de subcapas con números mágicos llenos, más un agujero, su primer estado excitado es el estado del agujero en el modelo de capas. Pero en ambos casos por lo regular tampoco está predicho el spin y la paridad.

Entre los números mágicos los primeros estados excitados de los núcleos casi muestran las regularidades esperadas según el modelo colectivo. Un ejemplo es el núcleo, par-par $^{92}U^{238}$, ilustrado en la figura 16-33. A la derecha están los niveles de energía observados y a la izquierda las predicciones de la fórmula mecánico-cuántica.

$$E = \frac{i(i+1)}{2\mathscr{I}}\hbar^2 \qquad i = 0, 2, 4, 6, \ldots \quad (16\text{-}33)$$

para los valores permitidos de la energía total E de un rotor simétrico tal como un elipsoide girando alrededor de un eje perpendicular a su eje de simetría con inercia rotacional, o momento

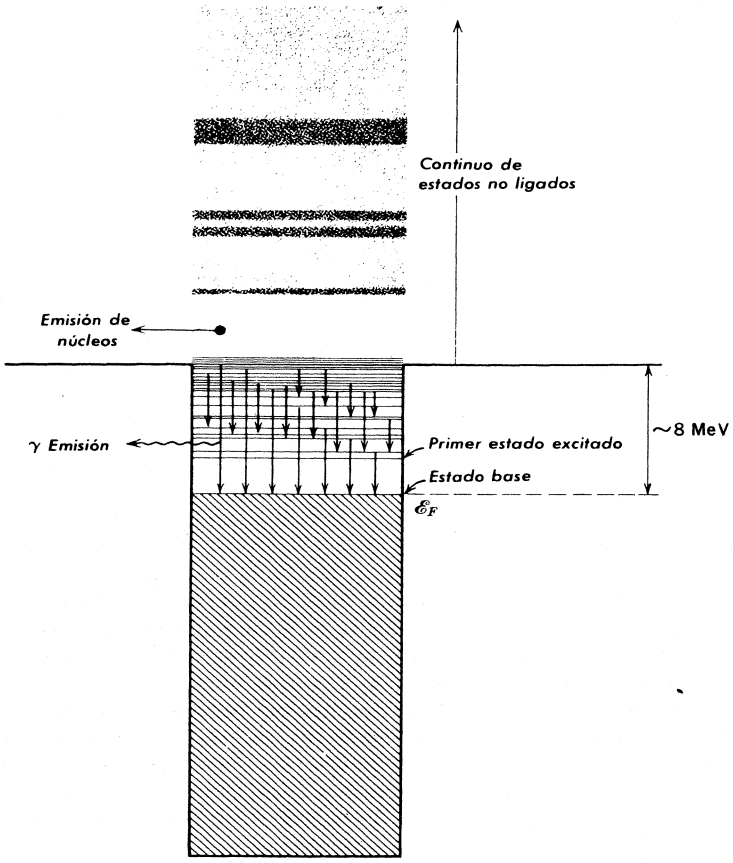


FIGURA 16-31
Vista general de los estados excitados de un núcleo típico.

FIGURA 16-32
Estados excitados bajos del $^8O^{17}$. Se muestran las energías de excitación, spin y paridades. El spin y la paridad del primer estado excitado están predichas correctamente por el modelo de capas, como lo están el spin y la paridad del estado base (ver figura 15-18). La energía del primer estado excitado no está predicha por el modelo y no lo están ninguna de las características de los estados excitados superiores.

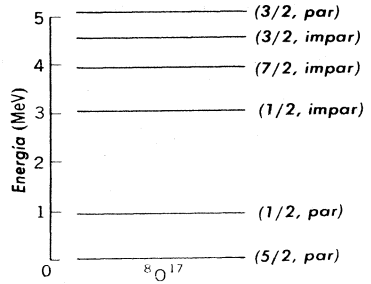
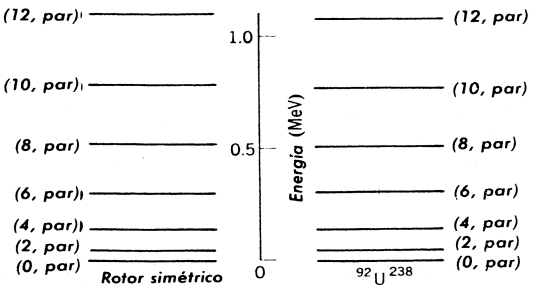


FIGURA 16-33
Estados excitados bajos del $^{92}U^{238}$. *Derecha:* datos. *Izquierda:* Predicciones para los estados rotacionales de un elipsoide simétrico de inercia rotacional $\mathscr{I}$. El valor de $\mathscr{I}$ se escogió para que concuerde mejor con las energías experimentales, siendo el valor $2940u\text{-}F^2$. La discrepancia promedio en el llenado es sólo 0.0204 MeV que indica el éxito del modelo. La mayor parte de esta discrepancia está en la forma de un desplazamiento pequeño hacia abajo de los estados rotacionales más altos con relación a los valores predichos. Se puede interpretar un aumento pequeño de $\mathscr{I}$ en estos estados como debido a efectos centrífugos.



de inercia, $\mathscr{I}$. La ecuación (16-33) es la misma que se derivó en el tratamiento de los espectros rotacionales de las moléculas diatómicas (12-1), excepto que (1) el número cuántico que se utilizará aquí es i en vez de r; (2) se evita la confusión utilizando el símbolo $\mathscr{I}$, en vez de I para la inercia rotacional y (3) puesto que se trata con un rotor simétrico, sólo aparecerán valores pares del número cuántico rotacional i. La razón para la última aseveración es que la eigenfunción rotacional para el sistema deberá ser simétrica respecto al intercambio de marcas de todas las partículas en las dos mitades del sistema, ya que una cantidad de esos intercambios para un número par de intercambios de las marcas de los fermiones que constituyen el sistema. Como se vió en la sección 12-9, la eigenfunción que describe el movimiento rotacional será simétrica en un intercambio como éste, sólo si el número cuántico rotacional es par. Entonces, se habrán de suprimir los valores impares de i en (16-33). En la figura 16-33 se muestra la gran concordancia entre (16-33) y los estados bajos del $^{92}U^{238}$, aclarando que los efectos colectivos en este núcleo lo deforman hasta una forma elipsoidal. En particular, la evidencia es que éste tiene esencialmente la misma forma en todos estos estados, incluyendo el estado base $\mathscr{I}$ debido a que las predicciones de (16-33) se obtienen utilizando un valor constante I de la inercia rotacional nuclear.

Por supuesto que ya se sabe, del análisis del modelo colectivo y los momentos cuadrupolares eléctricos de la sección 15-10, que núcleos con N-par, Z-impar o N impar, Z par, con N y Z entre los números mágicos por lo regular tienen forma elipsoidal. La tendencia a una forma elipsoidal es particularmente fuerte para núcleos en la región de los elementos de las tierras raras (los lantánidos) y es moderadamente intensa para núcleos en la región del uranio y los elementos justamente por arriba de él en la tabla periódica (las actínidos), ya que en estas regiones tanto N como Z están lejos de los números mágicos. Lo que es nuevo aquí es la evidencia para la forma elipsoidal del núcleo $^{92}U^{238}$ con N par Z par. Recordando que en la sección 15-2 se concluyó que si un núcleo tiene spin nuclear cero en su estado base, como es el caso para $^{92}U^{238}$ y todos los demás núcleos N par, Z par, entonces no sería posible observar una forma elipsoidal en su estado base aún si en realidad tiene tal forma, en mediciones promediadas con el tiempo como las determinaciones de desdoblamiento hiperfino del momento cuadrupolar eléctrico. Las mediciones sobre decaimiento y reacciones nucleares que conducen a los diagramas de niveles de energía de la figura 16-33 son sensibles a la forma real del núcleo y no al promedio temporal de todas las orientaciones posibles de la forma como ocurre con las mediciones de desdoblamiento hiperfino de núcleos con spin cero. Estas mediciones más sensitivas demuestran que el núcleo es elipsoidal. Mediciones similares demuestran que esto es generalmente cierto para todos los núcleos sin importar que N y Z sean pares o impares. Las únicas excepciones son los núcleos con N y Z o muy cercanos a los números mágicos, donde los efectos colectivos son insignificantes. Esos núcleos son ciertamente esféricos.

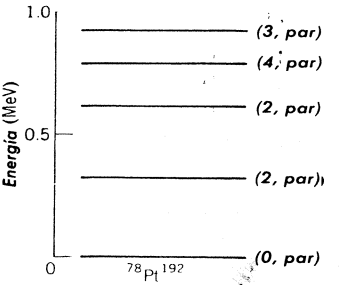


FIGURA 16-34
Estados bajos excitados de $^{78}Pt^{192}$. Para estos estados la forma nuclear es tanto vibracional como rotacional.

Puesto que la deformación de las formas nucleares de esféricos a elipsoidal es una consecuencia de los efectos colectivos, los núcleos donde estos efectos son intensos porque tanto N como Z están lejos de los números mágicos tienen, en sus estados de baja energía, deformaciones relativamente grandes y esencialmente rígidas, como el $^{92}U^{238}$. Estos estados consisten de las distintas rotaciones permitidas por la mecánica cuántica. Los núcleos en las que N y/o Z no están muy lejos de los números mágicos tienen deformaciones que no son muy grandes y no son rígidas. Los estados bajos de esos núcleos contienen vibraciones de sus formas entre un elipsoide elongado en la dirección de su eje de geometría y un elipsoide acortado en su dirección. El movimiento es más complicado por el hecho de que el núcleo también puede girar, no obstante, los primeros niveles de energía de los núcleos de este tipo se encuentran espaciados como los niveles de energía de un oscilador armónico simple. Un ejemplo se encuentra en los estados bajos excitados $^{78}Pt^{192}$, que se muestran en la figura 16-34. Observe que los estados colectivos más bajos del núcleo elipsoidal ya sean rotacionales, vibracionales o una combinación de ambos tienen energías de excitación mucho menores que los estados más bajos del modelo de capas de núcleos esféricos. Esto se puede ver comparando las figuras 16-33 y 16-34 con la figura 16-32.

Otra regularidad de los estados excitados bajos se encuentra al comparar estos estados en ciertos pares de núcleos cuyas descripciones según el modelo de capas son idénticas, excepto que los neutrones y protones están intercambiados. Un ejemplo de ésto el llamado *par espejo* de los núcleos es $^1H^3$ y $^2He^3$, cuyos estados base en la descripción del modelo de capas se mostraron en la figura 16-14. Otro ejemplo es $^3Li^7$ y $^4Be^7$. En general, dos núcleos forman un par espejo si contienen el mismo número de nucleones y si el número de protones en uno es igual al número de neutrones del otro. Se ha encontrado que los pares espejo tienen una función al permitir la determinación experimental de la constante de acoplamiento en el decaimiento β . La razón es que ya que las fuerzas nucleares son dependientes de la carga, no es posible distinguir entre neutrones y protones ya que sus eigenfunciones del estado base son idénticas, excepto por el efecto de la pequeña diferencia en las fuerzas relativamente débiles de Coulomb

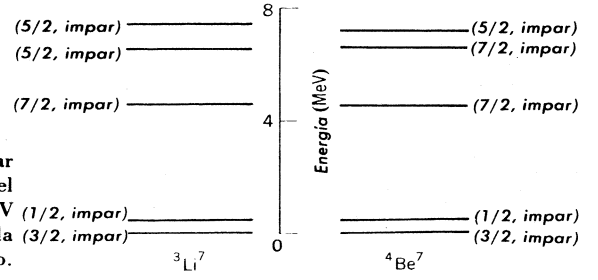


FIGURA 16-35
Estados bajos excitados del par especular $^3Li^7$ y $^4Be^7$. La energía del estado base del $^4Be^7$ es en realidad alrededor de 0.5 MeV mayor que el estado base de $^3Li^7$ gracias a la energía de repulsión de Coulomb en el primero.

en éstos núcleos con Z muy baja. Por la misma razón, sus eigenvalores del estado base son casi idénticos. Esto es, sus energías del estado base o masas son prácticamente las mismas, Además, las eigenfunciones y los eigenvalores de los estados excitados bajos de un par espejo serían esencialmente los mismos si las fuerzas nucleares fueran independientes de la carga. Entonces, deberá existir una estrecha correspondencia entre los spin, paridades y energías de estos estados en los dos miembros de un par espejo. Se ha encontrado que este es el caso. En la figura 16-35 se muestra un ejemplo que presenta los estados excitados bajos del $^{3}Li^{7}$ y $^{4}Be^{7}$. Se encuentran relaciones más complicadas entre los estados excitados bajos *triadas espejo,* tales como $^{5}B^{12}$, $^{6}C^{12}$, $^{7}N^{12}$, y conjuntos aún más grande de *isóbaros* (núcleos con valores comunes de A). Estas relaciones se estudiarán brevemente en la sección titulada Isospin.

16.9 Fisión y reactores

La fisión fue descubierta por Hahn y Strassman en 1939. Utilizando técnicas químicas encontraron que el bombardeo de uranio por neutrones produce elementos en la mitad de la tabla periódica. Inmediatamente se comprobó que se liberaría una cantidad de energía de enlace en la *fisión* de un núcleo de Z grande, en dos núcleos de Z intermedia debido a la consecuente reducción en la energía de Coulomb positiva. Las mediciones mostraron rápidamente que por la fisión se liberaba una energía de alrededor de 200 MeV que se iba en la energía cinética de los dos *fragmentos de la fisión.* Las mediciones también demostraron que en cada fisión se emitían dos o tres neutrones. Esto sugirió a mucha gente la posibilidad de utilizar esos neutrones para inducir otros núcleos de uranio a la fisión, utilizando los neutrones que se emitirían en otras fisiones en la misma manera y así consecutivamente en una *reacción en cadena.* Un cálculo trivial muestra que si, todos los núcleos en un bloque de uranio se pudieran fisionar en una reacción en cadena, la energía liberada sería $\sim 10^{6}$ mayor que la liberada al quemar un bloque de carbón o explotar un bloque de dinamita de la misma masa. (Este es el factor usual que se obtiene cuando se compara las energías nuclear a atómica o molecular). Debido a la escala de tiempo extremadamente corta que caracteriza el proceso nuclear se esperaría que la energía se libere mucho más rápidamente que en una explosión química, las potencialidades como arma eran obvias, particularmente por la inminencia de la II Guerra Mundial. Los eventos que siguieron dominan la historia de este siglo, pero aquí se tratará con las aplicaciones pacíficas de la fisión.

En un *reactor nuclear* la fisión procede con una rapidez controlada cuidadosamente. De la energía térmica producida cuando los fragmentos de la fisión llegan al reposo en los materiales del reactor se obtiene una fuerza de potencia continua. Después de muchos años de desarrollo cronológico los reactores nucleares han venido a ser fuentes de potencia que son altamente competitivos económicamente con el carbón o el petróleo. También son fuentes importantes de isótopos inestables que normalmente no se encuentran en la naturaleza y que por lo general se utilizan como trazadores para diagnosticar la operación de una variedad de procesos interesantes en medicina, biología, química e ingeniería, o utilizados para radioterapia. Los isótopos se producen en las reacciones nucleares indicadas por el intenso flujo de neutrones presente en un reactor.

La fisión ocurre en los nucleones de Z debido a que la energía de repulsión total de Coulomb de los protones en un núcleo decrece considerablemente si el núcleo se parte en dos núcleos más pequeños. La energía nuclear superficial aumenta en el proceso, pero su magnitud es mucho menor que la magnitud de la energía de Coulomb, de modo que el incremento en la energía superficial no altera el hecho de que un núcleo es energéticamente favorable para la fisión. La energía de Coulomb se minimiza si el núcleo se parte en dos fragmentos de la fisión que contienen igual número de protones pero usualmente la fragmentación no es completamente cinética debido a la preferencia por los números mágicos. En el ejemplo 15-6 se utilizaron los datos de la energía de enlace para mostrar que la energía asociada con la fisión del $^{92}U^{238}$ es próxima a 200 MeV. Este valor es bastante típico de la energía de fisión para otros isótopos del uranio.

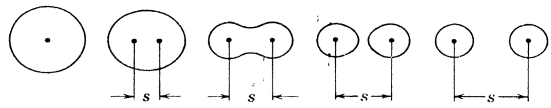


FIGURA 16-36
Representación esquemática de los pasos involucrados en el proceso de la fisión nuclear.

Los pasos involucrados en la fisión se indican gráficamente por el conjunto de dibujos de la figura 16-36. Estos difieren en un parámetro s que caracteriza el progreso de la fisión especificando algo imprecisamente la elongación del núcleo que se fisiona y la separación de los dos fragmentos de la fisión. La figura 16-37 es una gráfica esquemática de $V(s)$, que es parte de la energía del sistema que depende de s. Empezando con s pequeñas existe un cambio relativamente pequeño en la energía de repulsión de Coulomb con el aumento de s. pero el área de la superficie del núcleo aumenta rápidamente. Según el modelo de la gota, el aumento en el área de la superficie produce un aumento en la energía superficial. Entonces $V(s)$ aumenta conforme aumenta s, para s, pequeñas. Conforme s continúa aumentando un efecto de tensión superficial producido por la energía de la superficie ocasiona que el núcleo tome la forma de dos regiones conectadas por un paso estrecho y eventualmente el núcleo se parta. Después de esto, la energía superficial ya no cambia con s y $V(s)$ decrece con el incremento de s, siguiendo el decremento en la energía de repulsión de Coulomb de los dos fragmentos de la fisión. Puesto que $V(s)$ primero va hacia arriba y luego hacia abajo, necesariamente pasa por un máximo. Cálculos basados en el modelo de la gota muestran que para un núcleo típico de Z grande este máximo es aproximadamente 6 MeV por encima de $V(0)$. Se sabe que está aproximadamente 200 MeV por encima de $V(\infty)$. Por lo tanto se observa que los núcleos son normalmente estables a decaer por fisión ya que tienen energía total $E = V(0)$ en el fondo de la depresión en el potencial $V(s)$. El proceso puede tener lugar por penetración de barrera, pero, como la masa interviene en el exponente de (655) para la penetrabilidad de la barrera es muy grande y la probabilidad de penetración de barrera es extremadamente pequeña. Si $^{92}U^{238}$ decayera solamente por este proceso de *fisión espontánea*, su tiempo de vida sería $\sim 10^{16}$ años.

Un proceso de mucho mayor importancia es la *fisión inducida*. Usualmente esto surge cuando un núcleo captura un neutrón de baja energía. Como la energía de enlace E_n en el del último neutrón en un núcleo de Z grande es aproximadamente 6 MeV, en los casos favorables, el núcleo captor recibe energía suficiente para colocarse por encima de la barrera de fisión. Frecuentemente, esta energía de excitación alta produce vibraciones colectivas en las cuales resulta suficientemente prolongada para la fisión. Esto es como un núcleo compuesto altamente excitado con la mayor parte de su energía de excitación en la forma de vibraciones violentas. La fisión inducida es tal vez el mejor ejemplo de los movimientos colectivos que se implican en el modelo de la gota y forman la base del modelo colectivo. En la figura 16-38 se indica el proceso en términos de un diagrama de energía. Como se vio en el ejemplo 15-7, para el $^{92}U^{235}$ la energía de enlace del neutrón En que queda disponible cuando se captura el neutrón es aproximadamente 6.5 MeV, de modo que la fisión puede ocurrir aun si el neutrón no tiene

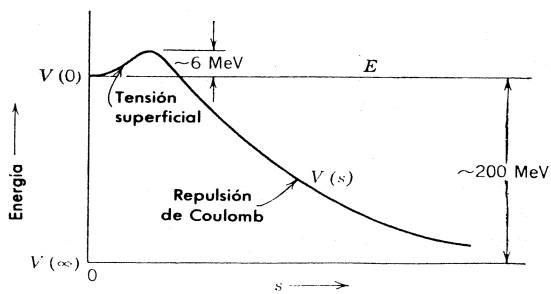


FIGURA 16-37
Diagrama de energía para un núcleo fisionable.

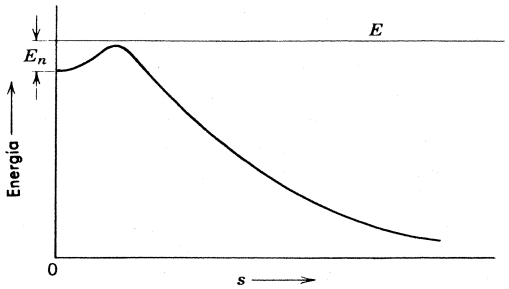


FIGURA 16-38
Diagrama de energía que ilustra la fisión inducida.

energía cinética. Esto también es cierto para $^{92}U^{233}$. Pero cuando el $^{92}U^{238}$ captura un neutrón, sólo queda disponible alrededor de 5 MeV de la energía de enlace, de modo que para ocasionar la fisión en este núcleo, un neutrón deberá tener una energía cinética del alrededor de 1 MeV. Como se explicó en el ejemplo 15-7, la diferencia en el comportamiento de estos isótopos proviene de la diferencia en la energía de apareamiento.

Se ha sobresimplificado este estudio de la fisión hablando como si el núcleo fisionable fuera esférico en su estado base. De hecho, en la sección 16-8 se vió que los núcleos de uranio son elipsoidales en su estado base. Aun antes de recibir cualquier energía de excitación el nucleón está algo elongado. Cuando recibe alrededor de 6 MeV de excitación por la captura de un neutrón, se prolonga más, va por encima de la barrera de fisión y se fisiona.

Recientemente se ha empezado a acumular evidencia que indica que la barrera de la fisión $V(s)$ mostrada en las figuras 16-37 y 16-38 también es probablemente una sobresimplificación y que en realidad la barrera tiene una joroba doble parecida al núcleo y está muy cerca del fondo de la depresión más honda con su elongación del estado base s',y es estable excepto para el proceso altamente improbable de penetración de barrera. Cálculos basados en el modelo colectivo, i. e., una combinación de los modelos de capas y de la gota, predicen que existe una segunda depresión más honda en $V(s)$ por la elongación más grande s'' . Para esta prolongación el núcleo también sería estable, excepto para penetración de barrera, si no tuviera exceso de energía. Una predicción de estos cálculos es que sería posible poner un núcleo fisionable en un estado con elongación s'', donde permanecería por mucho tiempo. Algunos experimentos de fisión controlados dan indicación fuerte de que esto es cierto. Debido a que estos cálculos también conducen a la predicción de que $Z = 114$ es número mágico,como se mencionó al final de la sección 16-2, los experimentos sobre fisión espontánea han hecho que los físicos tomen la predicción de $Z = 114$ muy en serio. Por lo que toca a la fisión inducida, la presencia de la depresión más superficial en $V(s)$ probablemente no hace mucha diferencia.

La posibilidad de utilizar la fisión para producir potencia en una reacción en cadena proviene del hecho de que *en cada proceso de fisión se emiten dos o tres neutrones*. Considerando la figura 16-

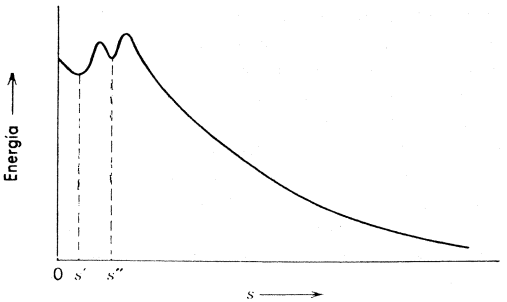


FIGURA 16-39
Barrera de fisión de doble joroba.

40 se puede obtener una idea de porqué sucede esto. La figura muestra los valores de Z y N de los núcleos que son más estables por cada valor de A (como en la figura 15-11). Estos núcleos están representados por la curva de estabilidad. El punto grande indica el núcleo fisionable y los dos puntos pequeños indican los fragmentos de la fisión. Por lo general, los fragmentos no son simétricos. En vez de esto, uno de los fragmentos tiene valores de Z y N próximos a los números 50 y 82 presumiblemente porque esto es energéticamente favorable. Pero ambos fragmentos tienen aproximadamente la misma relación Z/N que el núcleo fisionado. Ya que sus valores A son mucho más pequeños, sus razones Z/N son menores que A para los núcleos estables con estos valores de A. Los fragmentos de la fisión tienden a tener relativamente muchos neutrones. La mayoría de los reajustes necesarios tienen lugar lentamente mediante decaimientos β sucesivos de los fragmentos de la fisión, pero algunos de estos reajustes tienen efecto muy rápidamente en el momento de la fisión. Parte del decaimiento del núcleo compuesto que se fisiona tiene lugar por la evaporación de dos o tres neutrones de varios MeV de energía cinética. La figura 16-41 proporciona más información sobre la asimetría de los fragmentos de la fisión representando la distribución de sus valores A.

Otro proceso que involucra la emisión de neutrones, que es de probabilidad pequeña ($\sim 1\%$ de la probabilidad para la emisión rápida de neutrones por evaporación desde el núcleo compuesto) pero de gran importancia en facilitar el control de reactor, es el proceso de *emisión retardada de neutrones*. Como ejemplo se considerará el fragmento de la fisión $^{35}Br^{87}$. Debido a las reglas de selección del decaimiento β este núcleo ocasionalmente decae a un estado de su descendiente $^{36}Kr^{87}$ que está lo suficientemente excitado por permitirle emitir un neutrón, dejando el núcleo estable $^{36}Kr^{86}$. En este proceso los neutrones se emiten con un retraso característico de la vida media en 55 seg del $^{35}Br^{87}$. Otro ejemplo importante de emisión retardada de neutrones es el $^{54}Xe^{137}$. Para $^{36}Kr^{87}$ o $^{54}Xe^{137}$ el número N de neutrones es igual al número mágico 50, 61, 82, más uno. Entonces, el proceso depende usualmente, de pequeña energía de enlace del neutrón que en estos casos predice el modelo de capas.

En un reactor, las oportunidades para que los neutrones de una generación de fisión induzcan la generación siguiente se ven disminuidas debido a que los neutrones son dispersados por los núcleos de masa pequeña que se encuentran en el *moderador* que rodea las piezas de uranio. Rápidamente pierden energía al hacer retroceder estos núcleos, y ya no son capaces de inducir fisión en el $^{92}U^{238}$. Pero no se pierden como capturables para el $^{92}U^{238}$ ya que la moderación ocurre fuera de las piezas de uranio. El moderador es usualmente $^{6}C^{12}$, en forma de grafito, o $^{1}H^{2}$, en la forma de óxido de deuterio (agua pesada). Es posible utilizar $^{1}H^{1}$, pero sólo si el uranio está altamente enriquecido en $^{92}U^{235}$. La razón es que $^{1}H^{1}$ tiene una sección transversal grande a la captura de electrones para formar $^{1}H^{2}$, y éstos neutrones se pierden para la reacción en cadena. El propósito del moderador es reducir las velocidades de los neutrones al valor más bajo posible, de modo que sus longitudes de onda de de Broglie λ sean lo más largas posible. Debido a las propiedades ondulatorias de los neutrones, su sección transversal para captura por un núcleo de radio r' está limitado por el valor de λ, y no por el valor de r' (ver (16-32)). El moderador lleva los neutrones al equilibrio térmico a la temperatura de operación del reactor, lo cual hace $\lambda \gg r'$ y, por lo tanto, aumenta la sección transversal de captura $^{92}U^{235}$ para neutrones difundiéndose en las piezas del uranio. La sección transversal deberá de ser lo suficientemente larga como para que la probabilidad de que uno de los dos o tres neutrones de cada fisión induzcan subsecuentemente otra fisión al menos igual a uno. Cuando se enciende el reactor, ésta probabilidad se hace ligeramente mayor que uno y se reduce gradualmente hasta hacerse uno cuando el reactor llega al equilibrio en su nivel de operación. Los ajustes se hacen variando las longitudes de las *barras de control* insertadas en el reactor. Estas contienen núcleos no fisionables como $^{48}Cd^{113}$, que tiene una sección transversal de captura extremadamente grande para neutrones térmicos, debido a lo fortuito de la localización de las resonancias del núcleo compuesto. Los neutrones retardados facilitan el control de un reactor mediante la introducción de algunos neutrones en la cadena de reacción que se emiten con una constante de tiempo razonablemente grande. La energía cinética suministrada a los fragmentos de la fisión en el proceso de fisión se convierte en energía térmica cuando estos

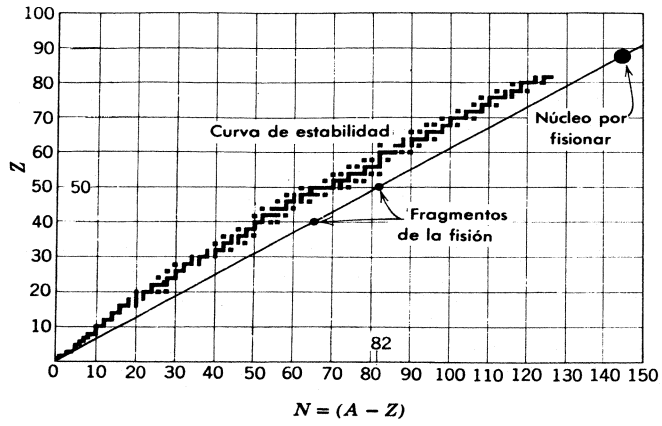


FIGURA 16-40
Se ilustra que los fragmentos de la fisión tienden a tener relativamente muchos neutrones.

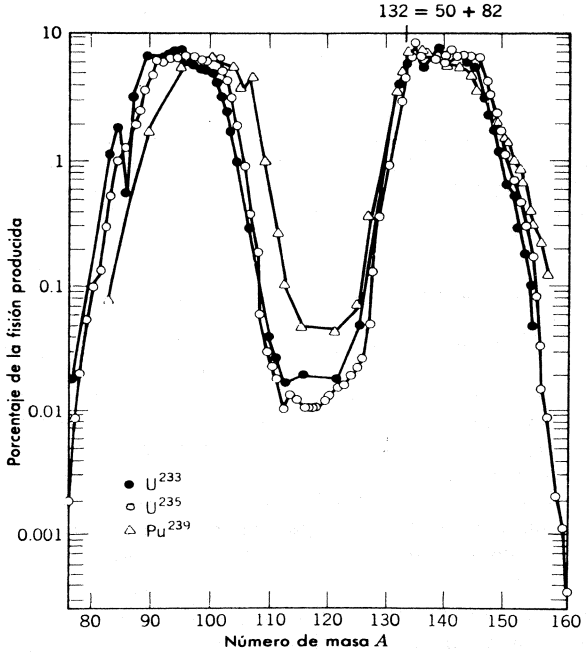


FIGURA 16-41
Los espectros de masas de los fragmentos producidos en la fisión inducida por neutrones de baja energía del $^{92}U^{233}$, $^{92}U^{235}$, y $^{94}Pu^{239}$.

fragmentos alcanzan el reposo en los materiales del reactor. Típicamente, este calor se utiliza para hacer vapor que mueve las turbinas que operan generadores produciendo potencia eléctrica.

Los *reactores autorregenerables* utilizan el $^{92}U^{238}$ con 99% de abundancia. Estos núcleos capturan neutrones de baja energía, pero los núcleos inestables resultantes $^{92}U^{239}$ realizan dos decaimientos β sucesivos pasando al núcleo estable $^{94}Pu^{239}$. Este producto final tiene la misma habilidad para fisión por captura de neutrón de baja energía que el $^{92}U^{235}$.

Ejemplo 16-10 El tiempo promedio transcurrido entre la emisión rápida de un neutrón en una fisión que tiene lugar en un reactor nuclear y la captura de ese neutrón para indicar la siguiente generación de la reacción en cadena, es del orden de 10^{-3} seg. (La mayor parte del tiempo es la requerida por el moderador para llevar el neutrón al equilibrio térmico). Utilice esta cifra para estimar el número de neutrones libres presentes en un reactor que opera a un nivel de potencia de 10^8 W.

En el ejemplo 15-6 se encontró que la energía liberada en la fisión producida por un neutrón es alrededor de

$$E \simeq 200 \text{ MeV} = \frac{200 \text{ MeV}}{\text{neutrón}} \times \frac{1.6 \times 10^{-13} \text{ joule}}{\text{MeV}} \sim 10^{-11} \text{ joule/neutrón}$$

Si un neutrón libre tiene un tiempo de vida antes de la captura de $\sim 10^{-3}$ seg y si en la captura produce una energía de fisión de $\sim 10^{-11}$ Joule, un neutrón libre produce una potencia de

$$p \sim \frac{10^{-11} \text{ joule/neutrón}}{10^{-3} \text{ seg}} \sim 10^{-8} \text{ W/neutrón}$$

por lo tanto, si el nivel de potencia del reactor es $P = 10^8$ W, el número de neutrones libres es

$$N = \frac{P}{p} \sim \frac{10^8 \text{ W}}{10^{-8} \text{ W/neutrón}} \sim 10^{16} \text{ neutrón}$$

El gran número, o flujo, de neutrones libres presentes en un reactor hace muy útil el dispositivo para producir isótopos inestables en el lado de Z bajas de la curva de estabilidad (emisores de electrón). Esto se hace colocando en el interior del reactor sondas que contienen isótopos estables apropiadamente escogidos. Los isótopos inestables se forman cuando los isótopos en las sondas capturan electrones. ◀

16.10 Fusión y el origen de los elementos

Se concluye este estudio de la física nuclear con un análisis de la fusión nuclear y su contribución en la producción de energía estelar y de los elementos químicos. La fusión involucra dos núcleos de A muy baja amalgamados para formar un núcleo más estable. La creciente estabilidad surge porque el valor de A del núcleo formado está cercano al valor $A \simeq 60$ donde la energía de enlace por nucleón se maximiza (ver figura 15-10). Desde el punto de vista del modelo de la gota, la situación podría explicarse estableciendo respecto a la estabilidad que los núcleos con A muy baja tienen mucha superficie, con relación a su volumen. La energía de Coulomb aumenta en la fusión, pero su magnitud es bastante pequeña para evitar que ocurra el proceso ya que los núcleos con A pequeña también tienen Z pequeña.

Es correcto decir que la fusión es el fenómeno más importante en la naturaleza. La fusión de núcleos con A pequeña en movimiento térmico es la fuente de energía del sol. De modo que en últimas consecuencias es la fuente de energía de todos los procesos físicos y biológicos en la tierra. Esta es la razón para esperar que algún día la fusión será utilizable directamente en la tierra para producir energía en un reactor de fusión. Debido a que la mayor parte del globo terráqueo está cubierto por el mar que contiene los isótopos de hidrógeno $^1H^1$ y $^1H^2$, el abastecimiento

de núcleos de A pequeña sería prácticamente inagotable. Una de las reacciones potencialmente útiles para un reactor de fusión es

$$^1H^2 + {}^1H^2 \rightarrow {}^2He^3 + {}^0n^1 + 3.2\ \text{MeV} \qquad (16\text{-}34)$$

donde la energía es el valor Q de la reacción. Pero es mucho más difícil construir un reactor de fusión que uno de fisión. El problema está en la barrera de Coulomb repulsiva que actúa entre los dos núcleos y que hay que vencer, o al menos penetrar, antes de que éstos queden lo suficientemente cerca para permitir que las fuerzas nucleares de corto alcance entren en juego y los fusionen.

En la figura 16-42 se grafica la sección transversal para la reacción de (16-34) como una función de la energía cinética de la partícula de bombardeo. La sección transversal no tiene un valor mensurable sino hasta que la energía cinética excede $\sim 10^4$ eV y aún a esta energía la sección es muy pequeña debido a que la reacción ocurre por penetración de la barrera de Coulomb que actúa entre los núcleos y que es de $\sim 10^6$ eV. A menos que la energía cinética sea apreciablemente más grande que $\sim 10^4$ eV la sección transversal y, por lo tanto, la rapidez de la reacción, será muy pequeña como para utilizarla prácticamente en un reactor de fusión. En el interior del sol ocurren reacciones similares, con la energía cinética de las partículas de bombardeo provenientes de su energía térmica. Esta energía es $\sim kT$, donde k es la constante de Boltzmann $\sim 10^{-4}$ eV/°K, y T es la temperatura interior del sol $\sim 10^7$ °K. Por lo tanto, la energía térmica o energía cinética a la temperatura interior del sol es solamente de $\sim 10^3$ eV y las reacciones de fusión proceden ahí con una rapidez extremadamente lenta. Por supuesto que el sol produce grandes cantidades de energía, pero se las arregla para que la rapidez de las reacciones individuales sea muy lenta. Un reactor de fusión térmico de dimensiones posibles para la tierra debería de tener una rapidez mucho más grande para las reacciones individuales. Entonces, su temperatura tendría que ser más alta, (al menos un orden de magnitud más alta que ¡la temperatura interna del sol!). Existen formas de alcanzar esa temperatura si se encuentra la forma de construir un recipiente que las soporte. El sol es tan masivo que los campos gravitacionales proporcionan, de manera automática, ese recipiente. En la tierra esto podría hacerse utilizando campos magnéticos que actuando sobre los núcleos cargados los contuvieran. Se han hecho esfuerzos para construir esos recipientes, llenarlos con hidrógeno y entonces calentar su contenido quemándolo, por ejemplo, en un haz de un láser. Ha habido algunas indicaciones de éxito pero sólo por poco tiempo, antes de que falle el recipiente. Otros intentos han utilizado láseres muy potentes para producir mucha energía térmica a pequeñas píldoras de material fundible para ocasionar que reaccione. En ese procedimiento, la energía se produciría en una secuencia de pequeñas explosiones y se absorberían dentro de un recipiente metálico fuerte que se calentaría como consecuencia de ésto. El obtener la fusión térmica para la producción de energía en la tierra continúa siendo uno de los grandes retos para la ciencia y la ingeniería.

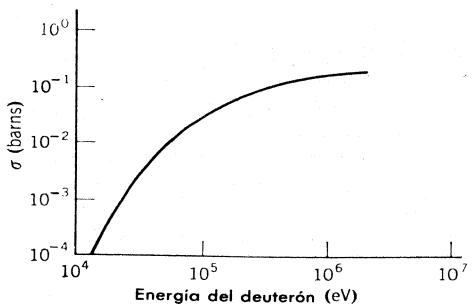


FIGURA 16-42
Sección transversal para la reacción en la cual se fusionan dos deuterones para formar $^2He^3$ más un neutrón.

No existen dificultades para obtener la fusión en la tierra por métodos no térmicos. Se puede hacer con facilidad utilizando un ciclotrón u otro acelerador para dar al núcleo de bombardeo energía suficiente para superar la barrera de Coulomb que rodea al núcleo blanco; pero la energía liberada en las relativamente pocas fusiones que se pueden producir por este medio es muy pequeña y aun microscópica comparada con la energía que se invierte para que funcione el acelerador. Por lo tanto, parece poco probable el llegar a utilizar la fusión no térmica como una fuente eficiente de energía.

Sin embargo, la fusión térmica eficiente ha tenido lugar desde hace mucho tiempo en las estrellas. Esta es la causa de la producción de energía en todas las estrellas y también de la producción en las estrellas de todos los elementos a través del fierro. Se cree que inicialmente las estrellas estaban formadas por gas de densidad extremadamente baja ($\sim$1 átomo /cm^3) que se sabe está distribuido por el espacio interestelar. El gas es principalmente hidrógeno pero contiene también aproximadamente 10% de helio que se piensa que se haya hecho por fusión del hidrógeno en la "gran explosión" que ocurrió cuando se formó el universo hace unos 10^{10} años, además existen pequeñas cantidades de elementos con Z grande y que se encuentran presentes en ciertas regiones por razones que se explicarán posteriormente.

En la teoría de la gran explosión que es perfectamente conocida, el universo eléctricamente neutro hubo de comenzar en una región que contenía neutrones comprimidos a una densidad extremadamente alta. En los primeros instantes debió haber tenido lugar el siguiente conjunto de procesos

$$
\begin{aligned}
&{}^0n^1 \rightarrow {}^1\mathrm{H}^1 + e + \bar{\nu} \\
&\bar{\nu} + {}^1\mathrm{H}^1 \rightarrow {}^0n^1 + \bar{e} \\
&{}^1\mathrm{H}^1 + {}^0n^1 \rightarrow {}^1\mathrm{H}^1 + {}^0n^1 + \gamma \\
&e + \bar{e} \rightarrow \gamma + \gamma \\
&\gamma \rightarrow e + \bar{e}
\end{aligned}
$$

y había equilibrio a muy altas temperaturas entre neutrones, protones, electrones, positrones, antineutrinos y radiación γ. La radiación, "enfriada" por corrimientos Doppler repetidos en la expansión subsecuente del sistema, constituiría la radiación isotrópica de 3°K del cuerpo negro cuya reciente detección proporciona algo de la evidencia experimental para la validez de la teoría de la gran explosión (ver sección 1-5). En la distribución con gran densidad en equilibrio que existió por poco tiempo antes de que el sistema explotara por él mismo, el helio debió formarse por las reacciones.

$$
\begin{aligned}
{}^1\mathrm{H}^1 + {}^0n^1 &\rightarrow {}^1\mathrm{H}^2 + \gamma \\
{}^1\mathrm{H}^2 + {}^1\mathrm{H}^2 &\rightarrow \begin{cases} {}^2\mathrm{He}^3 + {}^0n^1 \\ {}^1\mathrm{H}^3 + {}^1\mathrm{H}^1 \end{cases} \\
{}^2\mathrm{He}^3 + {}^0n^1 &\rightarrow {}^1\mathrm{H}^3 + {}^1\mathrm{H}^1 \\
{}^1\mathrm{H}^3 + {}^1\mathrm{H}^2 &\rightarrow {}^2\mathrm{He}^4 + {}^0n^1
\end{aligned}
$$

Cálculos detallados que involucran las secciones transversales para todas las reacciones en ambos conjuntos, demuestran que pudo haberse formado helio suficiente como para dar cuenta del 10% de abundancia que se observa actualmente en el espacio interestelar. El 90% restante debería, de acuerdo con las observaciones, estar esencialmente en forma de hidrógeno, habiéndose formado la mayoría de los protones del decaimiento β de los neutrones que se encontraban en el espacio libre después de la gran explosión.

De acuerdo con los conocimientos actuales, el primer paso en la formación de una estrella a partir del material gaseoso muy tenue del espacio interestelar, involucra algún tipo de fluctuación hacia arriba en la densidad en una región muy grande. En esa fluctuación, el gas se colecta en un cúmulo. Si es suficientemente grande se estabiliza debido a las atracciones

gravitacionales entre los átomos que contiene y empieza a crecer al atraer más átomos. Conforme crece el cúmulo, la creciente intensidad de las atracciones gravitacionales causa la presión interior y así la temperatura interior se eleva. Cuando la temperatura en el centro excede unos 10^5 °K los átomos de hidrógeno en esta región están completamente ionizados en un *plasma* de protones y electrones. Cuando la temperatura excede unos 10^7 °K los protones tienen energía cinética suficiente debida a su movimiento térmico como para tener una probabilidad pequeña de penetrar la barrera respulsiva de Coulomb que tiende a mantenerlos apartados. (El 10% de helio presente no participa en esta etapa ya que la temperatura es muy baja para la penetración de las barreras de Coulomb más altas que rodean estos núcleos). Entonces, dos protones se pueden fusionar y formar un deuterón, de acuerdo con la reacción

$$^1H^1 + {}^1H^1 \rightarrow {}^1H^2 + \bar{e} + \nu + 0.42 \text{ MeV}$$

donde la energía es la que se libera en el proceso. Puesto que el proceso requiere *tanto* la penetración de barrera como la interacción de decaimiento β débil éste ocurre a una rapidez extremadamente baja. La necesidad del decaimiento β surge del hecho de que las fuerzas nucleares no son capaces de hace que se forme el sistema $^2He^2$ (el diprotón), por las razones que se explicarán en el capítulo siguiente. No obstante que la razón para que el deuterón forme una reacción es muy pequeña, cuando existen suficientes deuterones se pueden formar concentraciones altas de helio mediante procesos que tienen razones relativamente altas, ya que ellas involucran la interacción nuclear fuerte.

En las estrellas, el helio se forma en un ciclo de reacciones que se denomina el ciclo *protón-protón* y que consiste de dos de las reacciones precedentes seguidas por dos de las reacciones

$$^1H^2 + {}^1H^1 \rightarrow {}^2He^3 + \gamma + 5.49 \text{ MeV}$$

y entonces mediante una reacción en la cual los dos núcleos de $^2He^3$ que se han formado se funden como sigue

$$^2He^3 + {}^2He^3 \rightarrow {}^2He^4 + {}^1H^1 + {}^1H^1 + 12.86 \text{ MeV}$$

Con los 1.02 MeV liberados cada vez uno de los dos positrones se aniquila con un electrón, la energía total liberada en un ciclo es 26.72 MeV. Pero un poco más del 1% de esta energía se la llevan fuera de la estrella los dos neutrinos. Lo restante más la contracción gravitacional, continúa calentando el centro.

Cuando la densidad de helio (incluyendo el que había inicialmente) en el centro del cúmulo que se ha formado dentro de la estrella empieza a ser suficientemente alta, se puede formar el carbón. Lo que sucede es que se combinan con otro núcleo $^2He^4$ para formar $^6C^{12}$, lo cual lo hace casi inmediatamente. El punto es que $^4Be^8$ no es estable y decaerá de regreso en dos $^2He^4$ La razón para esta improbable reacción sería esencialmente cero, si no fuera por la existencia de un estado excitado en el $^6C^{12}$ a una energía de aproximadamente 7.65 MeV cuando la temperatura es 10^8 °K, existe una resonancia en la reacción, que hace su sección transversal razonablemente grande, ya que las energías cinéticas de los tres núcleos $^2He^4$ combinados más el valor Q es igual a la energía del estado excitado en $^6C^{12}$. No se pueden utilizar procesos directos que involucren la adición sucesiva de nucleones a $^2He^4$ para formar elementos con A mayor que 4 ya que esos procesos son bloqueados por la completa inestabilidad de los núcleos con $A = 5$.

Cuando en el núcleo de la estrella se ha formado suficiente carbono, la fuente principal de la producción de energía es a través del *ciclo del carbono*, en el cual el carbono tiene la función de catalizador (es decir, reaparece al final del ciclo) para ayudar en la fusión de cuatro $^1H^1$ en un $^2He^4$, más positrones, neutrinos y rayos. El ciclo del carbono consiste del conjunto de reacciones

$$^6C^{12} + {}^1H^1 \rightarrow {}^7N^{13} + \gamma + 1.94 \text{ MeV}$$
$$^7N^{13} \rightarrow {}^6C^{13} + \bar{e} + \nu + 1.20 \text{ MeV}$$

$$^{6}C^{13} + {}^{1}H^{1} \rightarrow {}^{7}N^{14} + \gamma + 7.55 \text{ MeV}$$
$$^{7}N^{14} + {}^{1}H^{1} \rightarrow {}^{8}O^{15} + \gamma + 7.29 \text{ MeV}$$
$$^{8}O^{15} \rightarrow {}^{7}N^{15} + \bar{e} + \nu + 1.73 \text{ MeV}$$
$$^{7}N^{15} + {}^{1}H^{1} \rightarrow {}^{6}C^{12} + {}^{2}He^{4} + 4.96 \text{ MeV}$$

Con la energía liberada en la aniquilación de los dos positrones la energía total liberada en un ciclo es 26.72 MeV, justo como en un ciclo protón-protón. En el ciclo del carbono la estrella pierde un poco más del 5% de la energía por los neutrinos emitidos en los decaimientos β de mayor energía. La razón a cual ocurre el ciclo del carbono es mucho más alta que la razón para el ciclo protón-protón, ya que ningún caso en el ciclo del carbono está próximo a la lentitud del primer paso en el ciclo protón-protón. El sol aun no ha alcanzado la etapa en su desarrollo en la que el ciclo del carbono domine la producción de energía, no obstante que tiene algún ciclo del carbono. En una estrella con una masa mayor que aproximadamente dos masas del sol, la concentración gravitacional es muy rápida y la temperatura del núcleo alcanza rápidamente el valor $\sim 10^{8}$ °K requerido para la formación del carbono y del ciclo del carbono.

Conforme continúa la concentración del centro estelar, aumenta su temperatura y se forman elementos más pesados que el carbono. Esto se hace por primera vez por las capturas sucesivas de $^{2}He^{4}$ por $^{6}C^{12}$, formando $^{8}O^{16}$, luego $^{10}Ne^{20}$, y luego $^{12}Mg^{24}$. Pero cuando la temperatura es $\sim 10^{9}$ °K estos núcleos tienen suficiente energía térmica para penetrar sus barreras de Coulomb formando directamente núcleos de A par a través de $^{26}Fe^{56}$. Se pueden formar núcleos con valores de A comparables pero impares si los núcleos con A par son forzados por turbulencias hacia afuera del núcleo estelar a la zona circundante fría donde se está realizando el ciclo protón-protón. En esta zona las reacciones que pueden ocurrir son

$$^{10}Ne^{20} + {}^{1}H^{1} \rightarrow {}^{11}Na^{21} + \gamma$$
$$^{11}Na^{21} \rightarrow {}^{10}Ne^{21} + \bar{e} + \nu$$

Entonces, algunos de esos núcleos con A impar pueden participar en reacciones que conducen a la producción de neutrones. Un ejemplo es

$$^{10}Ne^{21} + {}^{2}He^{4} \rightarrow {}^{12}Mg^{24} + {}^{0}n^{1}$$

Los elementos más pesados que el fierro no se forman por fusión debido a que los valores de A exceden el valor $A \simeq 60$ donde la energía de enlace por nucleón se maximiza; mas allá de $A \simeq 60$ la repulsión de Coulomb de los protones se hace tan grande que ya no es favorecida energéticamente por un núcleo para capturar otro núcleo. Sin embargo, sí es favorecido este núcleo para capturar un neutrón ya que este libera la energía de enlace del neutrón de $\simeq 6$ MeV. Se forman núcleos a través de $^{83}Bi^{209}$ por una sucesión de captura de neutrones y decaimiento β empezando en $^{26}Fe^{56}$. Los neutrones provienen de reacciones tales como las del ejemplo dado en el párrafo anterior y el β decaimiento tiene lugar cuando es necesario ajustar la relación Z a A de un núcleo a un valor estable. Las abundancias de los núcleos que se forman en la sucesión de capturas de neutrones son inversamente proporcionales a sus secciones transversales de captura de neutrón, promediadas con la distribución térmica de energías de neutrón a temperaturas muy altas. Esto es cierto ya que, si un núcleo tiene una sección de captura de neutrón muy grande sólo existe una pequeña posibilidad de que no capture un neutrón y se convierta en algún otro núcleo. La abundancia de elementos en el sistema solar se infiere principalmente de la composición del sol vista en mediciones de los espectros atómicos y de los rayos cósmicos producidos en el sol e interceptados en la tierra. También se obtienen datos de los meteoritos y de la composición de la tierra misma. En la figura 15-1 se presentó la curva de abundancia desde el fierro hasta el bismuto. Esta es muy próxima al inverso de la curva para sección transversal de captura de neutrón. En promedio, la sección transversal aumenta (y las abundancias decrecen) conforme el valor A del núcleo aumenta,

simplemente porque el núcleo se hace más grande. Pero existen algunas discrepancias del promedio debidas al efecto de las subcapas llenas sobre las afinidades al neutrón y las energías de enlace, las cuales afectan las secciones transversales de captura de neutrón.

El elemento más pesado que se puede formar en el proceso de captura de neutrón estudiado aquí es el bismuto. La razón es que cuando $^{83}Bi^{209}$ captura un neutrón se hace $^{83}Bi^{210}$, que decae por α en $^{81}Ti^{206}$ con una vida media de sólo cinco días. Este decaimiento es tan rápido que tiene lugar antes de que haya tiempo para posteriores capturas de neutrón por el $^{83}Bi^{210}$ en el flujo moderado de electrones que normalmente existe en una estrella.

Cuando algunas estrellas llegan al final de su vida porque casi han agotado su suministro de hidrógeno, no se genera en el núcleo el "calor nuclear" suficiente para evitar un colapso gravitacional muy rápido. Entonces, explota en cosa de unos cuantos segundos con tremenda violencia y produce un tremendo flujo de neutrones. El ejemplo mas espectacular registrado en la historia de una *supernova* como estas, es una estrella que se observó en 1054 A. C. que brilló tanto que permitió el verla por un tiempo breve en pleno día. Su remanente se conoce ahora como la nebulosa del cangrejo. Los elementos más pesados que el bismuto se cree que se forman por capturas de neutrón sucesivas, empezando con $^{83}Bi^{209}$, y utilizando el intenso flujo de neutrones presente en una supernova. El proceso sucede tan rápidamente que el decaimiento α del $^{83}Bi^{210}$ no produce consecuencias.

El análisis anterior sobre la vida de una estrella supone que su composición original era puramente el primordial 90% de hidrógeno más el 10% de helio. Existen muchos ejemplos de esta "primera generación" de estrellas y también existen muchos ejemplos de la "segunda" o "tercera" generaciones de estrellas, las cuales se piensa que originalmente estuvieron compuestas parcialmente por remanentes de supernova; el sol es un ejemplo. En estas estrellas estarán presentes los elementos pesados y de hecho en abundancia razonable, aun antes de que se haya alcanzado la etapa en la que la fuente dominante de energía sea el ciclo del carbono.

PREGUNTAS

1. Dar una explicación cualitativa de por qué una partícula α puede penetrar una barrera de Coulomb.

2. ¿Cuál sería el efecto sobre los tiempos de vida en el decaimiento α y consecuentemente en las abundancias terrestres, de los elementos entre $A = 200$ y $A = 260$ si no hubiera números mágicos, de modo que las energías del decaimiento α de la figura 16-1 siguieran la tendencia general predicha por la fórmula semiempírica de la masa?

3. ¿Existe una serie radiactiva $4n + 4$?

4. ¿Cuál sería el sitio ideal para buscar las trazas de los elementos superpesados predichos $Z = 110$, $A = 294$?

5. Construir una figura que muestre un caso en el cual existan tres núcleos estables β con el mismo valor A impar.

6. Explicar por qué la emisión de una partícula con las propiedades postuladas por Pauli eliminan las dificultades con el impulso angular en el decaimiento β ¿Qué hay acerca del impulso lineal?

7. ¿En qué difieren los neutrinos y antineutrinos de los fotones si aquellos tampoco tienen ni carga ni masa en reposo?

8. ¿Cómo se justifica el hecho de que los electrones sean emitidos por núcleos en el decaimiento β cuando en el ejemplo 6-6 se mostró que los electrones no pueden estar contenidos en los núcleos?

9. En el experimento de Wu, ¿Cuál es la dirección del campo magnético aplicado para alinear los núcleos, desde el punto de vista normal y visto en el espejo? ¿Qué hay sobre la dirección del flujo de corriente en los arrollados del imán que produce el campo?

10. Considere que se ve el experimento de Wu en un espejo localizado debajo del núcleo (estando el espejo horizontal) en vez de en un espejo localizado a un lado del núcleo (estando el espejo colocado en forma vertical). Explicar cómo deberían modificarse los argumentos en el texto pero de tal forma que condujeran a las mismas conclusiones.

11. Las moléculas de azúcar tienen una helicidad definida. ¿Cuál piensa usted que es la causa?

12. Considere los momentos monopolar, dipolar y cuadrupolar eléctrico y magnético de un núcleo. ¿Siempre se les encuentra a cada uno de ellos con un valor constante distinto de cero? ¿Con un valor oscilatorio? Explique por qué algunos de éstos casos no ocurren y que hacen los nucleones en los casos en los que ocurren.

13. La radiación dipolar eléctrica se emite con un patrón espacial característico (ver apéndice B). ¿Esto sugiere una técnica experimental para determinar el tipo de radiación emitida en un decaimiento γ ? ¿Cuál sería la dificulatad para utilizar esa técnica?

14. En los decaimientos γ desde estados de energía de excitación de alrededor de 1 MeV o menos, a los estados base, la radiación dipolar eléctrica casi nunca se observa. Utilice el modelo de capas para explicar ésto.

15. A partir del modelo de capas encuentre las regiones de la tabla periódica en las cuales los primeros estados excitados de los núcleos tienen tiempos de vida particularmente largos para el decaimiento γ.

16. Mediciones de desdoblamiento hiperfino le indican que el spin del estado base de un núcleo es $i = 3/2$. ¿Cuáles son los valores posibles de l de la subcapa ocupada por el nucleón causante del spin? ¿Qué otra información le indicaría cuál de éstos es el valor real? ¿Qué podría usted medir para obtener esta información?

17. Explique exactamente por qué el potencial del modelo óptico que un núcleo ejerce sobre un nucleón de bombardeo de energía 50 MeV es diferente del potencial del modelo de capas que este ejerce sobre uno de sus propios nucleones. ¿Cómo esperaría usted que fuera el potencial del modelo óptico para un nucleón de bombardeo de energía 5 MeV?

18. ¿Por qué es más fácil para un nucleón incidente entrar a un núcleo, que escapar para uno cualquiera de los nucleones, que resultan de su primera colisión?

19. ¿Cuáles son las diferencias entre estados de partículas simple y estados de muchas partículas? ¿Cómo están relacionados? ¿Qué hay acerca de los estados de decaimiento γ ?

20. Si el núcleo compuesto $^{30}Zn^{64}$ olvidara los detalles de cómo se formó, no habría diferencia si se le excitara por bombardeo de $^{29}Cu^{63}$ con protones, o $^{28}Ni^{60}$ con partículas α ya que se excitarían los mismos estados de muchas partículas. Diseñe un experimento para probar esta predicción.

21. ¿Qué diferencia (si la hay) existe entre una deformación nuclear elipsoidal permanente, vista en los estados base y bajos de muchos núcleos Z par, N par, y un momento cuadrupolar eléctrico nuclear?

22. ¿Por qué es razonable esperar que la distribución espacial de protones en un núcleo sea aproximadamente la misma que la distribución espacial de neutrones?

23. Los reactores nucleares son particularmente solicitados para alimentar submarinos. De razones para que ésto sea así.

24. ¿Puede usted diseñar una configuración de campos magnéticos capaz de, al menos desde el punto de vista ingenuo, contener núcleos en un reactor de fusión térmica?

25. ¿Por qué es imposible para dos protones el fusionarse como en el primer paso del ciclo protón-protón, sin que simultáneamente tenga lugar un decaimiento β ?

26. ¿Qué le sucede a los rayos γ emitidos en las reacciones nucleares estelares del ciclo protón-protón o del ciclo del carbón?

27. ¿Cómo sería posible utilizar un detector de neutrinos sobre la tierra para indicar si la reacción dominante en el centro del sol es el ciclo protón-protón o el ciclo del carbono?

PROBLEMAS

1. Utilice la fórmula semiempírica de la masa para predecir la energía del decaimiento α del $^{83}Bi^{210}$ (sugerencia: tome la masa atómica del $^{2}He^{4}$ directamente de la tabla 15-1) (b) Compare sus resultados con la energía del decaimiento α mostrada en la figura 16-1.

2. Derivar (16-4), relacionando el tiempo de vida a la rapidez de decaimiento.

3. Derivar (16-5), relacionando el tiempo de vida a la vida promedio.

4. Los núcleos inestables, de razón de decaimiento R, se producen a una rapidez constante I en las reacciones nucleares causadas por un bombardeo desde un ciclotrón. Si el proceso de producción comienza en $t = 0$, calcular el número de estos núcleos que estarán presentes en $t = t'$. (Sugerencia: la ecuación por resolver se obtiene reescribiendo (16-2) en la forma $dM/dt = -NR$ y añadiendo I al segundo miembro. ¿Podría usted justificar ésto?

5. Demostrar la validez de (16-6), la relación entre los números de los núcleos que decaen y su rapidez de decaimiento, en equilibrio radiactivo. (Sugerencia: escriba un conjunto de ecuaciones comparables a (16-2). El primero de los conjuntos es exactamente como este y los otros contienen dos términos similares en el segundo miembro. Entonces muestre inmediatamente que (16-6) es una solución de estas ecuaciones tomando en cuenta que la rapidez de decaimiento del precursor es muy pequeña comparada con la rapidez de decaimiento de los descendientes).

6. El $^{90}Th^{232}$ decae por α en su primer descendiente $^{88}Ra^{228}$. Se observa que una laminilla muy delgada que contiene 1.0 g de $^{90}Th^{232}$ emite partículas α en este decaimiento con una rapidez de 4100/seg. Utilice estos datos para mostrar que la vida promedio de $^{90}Th^{232}$ es 1.4×10^{10} años.

7. El $^{82}Pb^{208}$ es el descendiente estable final de la serie radiactiva cuyo precursor es $^{90}Th^{232}$ (ver figura 16-5). La vida media del precursor es 1.4×10^{10} años. Una pieza de torio que contiene un kilogramo de $^{90}Th^{232}$ contiene también 200 g de $^{82}Pb^{208}$. (a) Suponiendo que todo el $^{82}Pb^{208}$ en la roca proviene del decaimiento de $^{90}Th^{232}$, y que no se ha perdido nada, calcular la edad de la roca; esto es, calcular cuántos años han pasado desde que el torio se concentró en los minerales de la roca y empezó el equilibrio de decaimiento. (b) Existen un total de seis partículas α emitidas en el decaimiento de las series radiactivas. Suponiendo que un número despreciable de ellas pudo escapar de la roca debido a que esta es muy gruesa, calcular qué tanto helio originado por los decaimientos α deberá haber en la roca. (c) El primer descendiente de la serie $^{88}Ra^{228}$, decae con vida media 5.7 años en un segundo descendiente $^{89}Ac^{228}$. Calcular qué tanto $^{88}Ra^{228}$ deberá haber en la roca.

8. (a) Utilizar la fórmula semiempírica de la masa para evaluar los puntos sobre la parábola de masa $A = 27$ para los únicos tres valores de Z que se han encontrado con este valor de A, digamos $Z = 12, 13, 14$ (sugerencia: sólo es necesario evaluar los términos de la fórmula que dependen explícitamente de Z). (b). ¿Qué valor de Z corresponde al núcleo estable? (c) Encontrar los tipos de decaimiento y las energías de decaimiento para los decaimientos β de los núcleos inestables.

9. El ejemplo 16-13 muestra que el decaimiento β de $^{4}Be^{7}$ a $^{3}Li^{7}$ procede sólo a través de captura de electrón ya que la diferencia en masa atómica es 0.00093u, que es menor que dos masas electrónicas en reposo. Considere un núcleo de $^{4}Be^{7}$ inicialmente en reposo, que captura un electrón K y emite un neutrino. (a) Estimar la velocidad de retroceso del núcleo después de que se completó el proceso. (Sugerencia: la energía de retroceso del núcleo es sumamente pequeña). (b) Sugiera una técnica para detectar la captura del electrón.

10. La tabla siguiente enlista tres puntos del espectro de impulsos medido, $R(p_e)$, de los electrones emitidos en el decaimiento de un núcleo de Z pequeña

$\frac{p_e}{mc}$	2.8	4.9	6.9
$R(p_e)$	375	500	250

(a) Hacer una gráfica de Kurie de éstos puntos. (b) Extrapolar para encontrar el punto extremo $K_e^{\max}$ del espectro y asi determinar la energía de decaimiento E.

11. Varios ejemplos de los núcleos inicial y final en los decaimientos β y sus estados base, spin y paridades se han enlistado aquí. Para cada decaimiento entre los estados base, determine si están permitidos por las reglas de selección de Fermi o de Gamouw-Teller. Si está prohibido, estimar a grosso modo el factor que suprime la rapidez de decaimiento. (a) $^{2}He^{6}$ (O, par) $\rightarrow {}^{3}Li^{6}$ (l, par); (b) $^{4}Be^{10}$ (0, par) $\rightarrow {}^{5}B^{10}$ (3, par); (c) $^{16}S^{35}$ (3/2, par) $\rightarrow {}^{17}Cl^{35}$ (3/2, par); (d) $^{39}Y^{91}$ (1/2, impar) $\rightarrow {}^{40}Zr^{91}$ (5/2, par).

12. (a) Utilizando una información dada después de (16-16), que representa el decaimiento β del neutrón, calcular el valor FT del decaimiento. (b) Comparar con el valor calculado en el ejemplo 16-4.

13. (a) Utilizar el valor FT obtenido en el problema 12 para estimar el valor de la constante de acoplamiento del decaimiento β. (b) Comparar con la estimación obtenida en el ejemplo 16.5. (c) ¿Qué justificación existe para suponer que el elemento de matriz nuclear es esencialmente igual a uno para el decaimiento β del neutrón?

14. Considere un conjunto de cargas positivas que se mueven en una región confinada, como protones en un núcleo, e interactúan con un campo externo de radiación electromagnética. La densidad de carga es ρ, de modo que la densidad de corriente es $\sim \rho v$, donde v es la velocidad característica de las cargas en movimiento. Demostrar que la energía de interacción entre el momento dipolar magnético de las cargas y el campo magnético externo es menor por un factor de $\sim v/c$ que la energía de interacción entre el momento dipolar eléctrico y el campo eléctrico externo. Puesto que los valores de los elementos de matriz para radiación dipolar magnética y eléctrica son proporcionales a las energías de ésta interacción y puesto que la rapidez de transición es proporcional a los "cuadrados" de los elementos de matriz, la rapidez de transición de dipolo magnético es menor que la rapidez de transición de dipolo eléctrico por un factor de $\sim (v/c)^2$. (Sugerencia: (i) demostrar que la razón de las energías de interacción es igual al producto de la razón de los momentos dipolares magnético a eléctrico multiplicado por la razón de las intensidades de campo magnética a eléctrica. (ii) Argumente el que la relación de los momentos dipolares magnético a eléctrico es igual a la razón de la densidad de corriente a la densidad de carga. (iii) Evaluar la razón de las intensidades de campo magnético a eléctrico para radiación electromagnética en el vacío).

15. Considere un conjunto de cargas positivas q que se mueven en una región de dimensiones lineales $\sim r'$, e interaccionan con la parte eléctrica de un campo externo de radiación electromagnética de longitud de onda $\sim \lambda$. Demostrar que la energía de interacción entre el momento cuadrupolar eléctrico de las cargas y el campo eléctrico externo es menor por un factor de $\sim r'/\lambda$ que la energía de interacción entre el momento dipolar eléctrico y el campo eléctrico externo. Por las razones expuestas en el problema 14 esto conduce a la conclusión de que la rapidez de la transición cuadrupolar eléctrica es menor que la rapidez para la transición dipolar eléctrica por un factor de $\sim (r'/\lambda)^2$. (Sugerencia: (i) considere un campo eléctrico senoidal $E = E_0 \operatorname{sen} 2\pi(x/\lambda - vt)$. (ii) La energía del dipolo eléctrico es E multiplicado por su momento dipolar $\sim qr'$. (iii) (La energía del momento cuadrupolar eléctrico es $\partial E/\partial x$ veces su momento cuadrupolar $\sim qr'^2$.)

16. Los spin y paridades del estado base, primer estado excitado y segundo estado excitado del $^{62}Sm^{152}$ son (0, par), (2, par) y (1, impar). Determinar los tipos de radiación emitida en el decaimiento γ entre estos estados.

17. Verificar que las partes de las reglas de selección del decaimiento γ que relaciona L con los spin nucleares representan los requisitos de conservación del impulso angular. Utilice el hecho de que un rayo γ proveniente de una transición de multipolaridad L lleva L unidades de impulso angular.

18. Probar que las integrales en (16-26) y (16-27) que representan las componentes de los elementos de matriz de cuadrupolo eléctrico y dipolo magnético son cero a menos que los estados nucleares inicial y final tengan la misma paridad.

19. Considere que se realiza un experimento de absorción resonante con la fuente y el absorbedor sin estar a baja temperatura, utilizando la transición entre el primer estado excitado y el estado base de $^{77}Ir^{191}$ considerado en el ejemplo 16-7. (a) Calcular qué tanta velocidad habrá de darse al emisor

para obtener un corrimiento Doppler suficiente para compensar el retroceso de la fuente y del colector, de modo que se obtenga absorción resonante. (b) Sería posible obtener la velocidad requerida montando la fuente en la periferia de una centrífuga?. (c) ¿Se obtendría de esta manera una resonancia angosta?

20. Las reacciones $^1H^1 + {}^3Li^7 \rightarrow {}^4Be^7 + {}^0n^1$ se utilizan algunas veces para producir neutrones monoenergéticos de una fuente de protones monoenergéticos. El valor Q de la reacción es -1.64 MeV. Si con un haz de protones de 5 MeV se bombardea un blanco de $^3Li^7$ ¿a qué ángulo del haz se emiten neutrones de 2.5 MeV?

21. Utilice los valores Q de las tres reacciones enlistadas a continuación para calcular la energía disponible para el decaimiento β del $^{14}Si^{31}$.

$$^1H^2 + {}^{15}P^{31} \rightarrow {}^{14}Si^{29} + {}^2He^4 \qquad Q = 8.158 \text{ MeV}$$
$$^1H^2 + {}^{14}Si^{29} \rightarrow {}^{14}Si^{30} + {}^1H^1 \qquad Q = 8.388 \text{ MeV}$$
$$^1H^2 + {}^{14}Si^{30} \rightarrow {}^{14}Si^{31} + {}^1H^1 \qquad Q = 4.364 \text{ MeV}$$

22. Considere una eigenfunción que es una onda que viaja en una sola dimensión

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad \text{donde} \qquad k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$$

Tome la energía potencial *V compleja,* de modo que se pueda escribir $V = V_R + iV_I$. (a) Demostrar que k es complejo y se puede escribir como $k = k_R + ik_I$. (b) Demuestre que la amplitud de la onda viajera es una exponencial decreciente de x. Eigenfunciones como esta se utilizan para describir la absorción de partículas que viajan a través del potencial complejo del *modelo óptico.* (c) ¿En qué distancia decrecería la densidad de probabilidad asociada en un factor de 1/e?

23. La sección transversal total para la fisión del $^{92}U^{235}$ por neutrones incidentes de energía de 1 MeV es de alrededor de 1 bn. Si un neutrón como estos pasa a través de una laminilla de $^{92}U^{235}$ de masa por unidad de área 10^{-1} kg/m^2, ¿Cuál es la probabilidad de que produzca fisión?

24. Cuando un haz de 10^{-8} A de protones de 17 MeV incide sobre una laminilla de $^{29}Cu^{63}$ de masa por unidad de área de 10^{-2} kg/m^2, se observa que un contador de área 10^{-5} m^2 a 1 m del blanco detecta 240 protones dispersados elásticamente por minuto si se coloca a un ángulo de 30° del haz incidente. Determinar el valor de la sección transversal diferencial.

25. Existe una resonancia en la sección transversal para neutrones que inciden sobre $^{92}U^{235}$ con el siguiente conjunto de parámetros Breit-Wigner medidos: $E_i = 0.29$ eV $\Gamma = 0.140$ eV; $\Gamma_n = 0.005$ eV (a) Demostrar que $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma$, y evaluar Γ_γ. (b) Calcular la sección transversal total de reacción en el pico de resonancia $\sigma_r(E_i)$. Las mediciones muestran que alrededor del 75% de $\sigma_r(E_i)$ interviene en la fisión (c) Calcular el tiempo de vida del núcleo compuesto formado en esta resonancia.

26. Las energías y spin de los primeros cuatro estados excitados de $^{72}Hf^{180}$ son: 0.093 MeV, $i = 2$; 0.309 MeV, i = 4; 0.641 MeV, $i = 6$; 1.085 MeV, $i = 8$. (a) ¿Qué tan buenas son las razones de estas energías con las predicciones de (16-33)? (b) Utilice esta ecuación para evaluar la inercia rotacional del núcleo.

27. (a) Utilice (15-16) con $Q = 0$ para calcular la energía perdida por un neutrón de fisión de 1 MeV al retroceder $^6C^{12}$, si se dispersa elásticamente a un ángulo típico de 90° de un núcleo en el moderador de un reactor nuclear. (b) ¿Qué tanta energía pierde en una dispersión a 90° si su energía se ha reducido a 0.001 MeV? (c) ¿Qué tanta energía tiene, en promedio si está en equilibrio térmico a una temperatura de operación de 500°K? (d) Estimar el número de dispersiones requeridas para llevar al neutrón al equilibrio térmico.

28. Comparar la energía liberada, por kilogramo de combustible consumido, en la reacción de fusión térmica de (16-34) con la misma figura de mérito para la fisión del $^{92}U^{235}$.

17

Partículas elementales

17.1 Introducción 701

Fuerzas nucleónicas como una interfase entre la física nuclear y de partículas; investigación de la microestructura de la materia.

17.2 Fuerzas Nucleónicas 701

Revisión de la información previamente considerada; estado base del deuterón y asimetría del potencial; dependencia del spin; independencia de la carga; dispersión por intercambio de carga y potencial de Serber; coraza repulsiva; término spin-órbita; descripción aproximada de la interacción nucleónica.

17.3 Isospín 715

Sistemas de dos nucleones correlacionados por isospín; isospín de un sólo nucleón; niveles análogamente isobáricos; conservación del isospín en las interacciones nucleónicas.

17.4 Piones 717

Campos piónicos; origen del intercambio en interacciones nucleónicas; argumento del principio de incertidumbre para la masa piónica; potencial de Yukawa y ecuación de Klein-Gordon; asignación de los números cuánticos de spin; paridad e isospín; número bariónico; decaimiento; muones y neutrinos muónicos; interacciones débiles y fuertes.

17.5 Muones 725

Leptones; asignación de los números cuánticos; conservación del número leptónico; bosón intermedio.

17.6 Extrañeza 727

Producción de K y Λ ; asignación de números cuánticos; isospín de antipartículas; conservación del número bariónico; decaimiento K y Λ ; cambio del isospín en interacciones débiles; introducción de la extrañeza; extrañeza de las antipartículas; conservación de la extrañeza en interacciones fuertes y

variación en interacciones débiles; partículas Σ, Ξ, y Ω ; reglas de conservación para el isospín y la extrañeza en interacciones electromagnéticas; mesones η .

17.7 Interacciones fundamentales y leyes de conservación **732**

Resumen de intensidades, propiedades cuánticas del campo, rangos, y signos de las interacciones fundamentales; estudio de la interacción gravitacional; resumen de las cantidades que se conservan en las diversas interacciones; conjugación de la carga y reversibilidad del tiempo en el experimento de Wu; teorema CPT; decaimiento en el sistema K^0, $\overline{K^0}$ y reversibilidad del tiempo; leyes de conservación y propiedades de simetría.

17.8 Familias de partículas elementales **736**

Resumen de las propiedades de las partículas; hiperones; hadrones; resonancias bariónicas y mesónicas; predicciones de las leyes de conservación con respecto a las reacciones de partículas.

17.9 Hipercarga y Cuarks **739**

Introducción de la hipercarga; SU(3); propiedades de los cuarks; mesones y bariones en términos de cuarks; problemas con el modelo de cuarks; partones.

Preguntas **742**

Problemas **743**

17

Partículas elementales

17.1 Introducción

Este capítulo se inicia con un estudio cualitativo, pero bastante completo, de las fuerzas nucleares que actúan entre dos nucleones. El tema se encuentra en la frontera entre los campos de la física nuclear y la física de las partículas elementales, y su estudio conduce de modo natural al estudio de las partículas elementales. A lo largo del tema se obtendrá también una perspectiva más completa de las propiedades básicas de, y las interrelaciones entre, las interacciones fundamentales y las leyes de conservación de la naturaleza.

La historia de la física cuántica puede verse como una secuencia de sondeos, con resolución cada vez creciente, de la estructura microscópica de la materia. El primer paso fué el descubrimiento de que la materia está compuesta de aproximadamente 90 átomos diferentes. En ese tiempo los átomos se consideraron como partículas elementales. (La palabra viene del griego *átomos* = indivisible). Después, se encontró que los átomos se componen de núcleos y electrones. Posteriormente, se descubrió que los núcleos consistían de neutrones y protones. En esta etapa, se tenía una situación muy satisfactoria -toda la materia parecía estar compuesta de diversas combinaciones de un número pequeño de partículas elementales: el neutrón, el protón, y el electrón. Sin embargo, después se encontró que también había mesones π. Su descubrimiento fué seguido del de otros muchos mesones relacionados, y otras partículas, en números cada vez mayores, relacionadas con los neutrones y los protones. En la actualidad, el número de partículas elementales se ha vuelto tan grande, que resulta razonable especular que podrían estar compuestas de varias combinaciones de un conjunto pequeño de partículas aún más elementales, como fue en el caso de los átomos. El capítulo termina, y así también el libro analizando lo que puede ser el principio de la etapa final de la secuencia- el postulado de que existe un conjunto de tres partículas, llamadas cuarks, que podrían ser verdaderamente elementales.

17.2 Fuerzas Nucleónicas

En el estudio de los núcleos se obtuvo alguna información acerca de las fuerzas nucleares que actúan entre nucleones, las cuales serán denominadas *fuerzas nucleónicas*. Como los núcleos se estudian en términos de modelos y como los modelos no implican el comportamiento detallado de estas fuerzas, sólo se han presentado algunas de sus características generales. Estas son:

1. Las fuerzas nucleónicas son *fuertes*. La energía asociada con dicha fuerza es mayor que la asociada con el electromagnetismo por 1 ó 2 órdenes de magnitud, mayor que la asociada con el

decaimiento β por aproximadamente 12 órdenes de magnitud, y mayor que la asociada con la gravitación por aproximadamente 40 órdenes de magnitud.

2. Las fuerzas nucleónicas son de *corto alcance*. Tienen una distancia de corte de aproximadamente 2F, de modo que dos nucleones que se crucen a una distancia mayor no interactúan por medio de la fuerza nucleónica.

3. Las fuerzas nucleónicas, por su efecto en general, son *atracción*. De otra forma, no existirían los núcleos ya que los nucleones no estarían ligados entre sí.

4. Las fuerzas nucleónicas son *independientes de la carga*. Es decir, no distinguen entre protones y neutrones. Hay evidencia de lo anterior en la tendencia de los núcleos con Z pequeña de tener $N = Z$, y en las semejanzas entre los niveles profundos que presentan parejas de núcleos espejo.

5. Las fuerzas nucleares se *saturan*. Este término describe el hecho de que un nucleón en un núcleo típico, experimenta interacciones de atracción sólo con un número limitado de los otros muchos nucleones. Esto debe ser cierto puesto que de otra forma la energía promedio por nucleón, $\Delta E/A$, sería proporcional a A, en lugar de ser aproximadamente independiente de A.

La mayor parte de la información respecto de las fuerzas nucleónicas que se puede obtener de un estudio de sistemas tan complicados como un núcleo típico, ha sido enumerada arriba. Estudiando sistemas más simples que contengan tan sólo dos nucleones, se puede obtener información más detallada, pues en ese caso las fuerzas nucleónicas presentan sus efectos más directamente observables. El más sencillo de estos sistemas es el núcleo de *deuterio*, $^1H^2$, o *deuterón*, en su estado base, que consiste de un neutrón y un protón ligados entre sí por la fuerza nucleónica. En esta sección se estudiará este sistema y otros sistemas que contienen dos nucleones no-ligados. Para evitar cálculos mecánico-cuánticos complicados, el estudio se hará en general en términos cualitativos. De todos modos, sin embargo, se hará ver como se han utilizado los análisis de ciertos experimentos clave para la determinación de las propiedades de las fuerzas nucleónicas. Al final de la sección se concluye presentando una descripción cuantitativa de las más importantes de estas propiedades. En una sección subsiguiente se considerará la teoría mesónica del origen de las fuerzas nucleónicas.

El estado base del deuterón está caracterizado por las cantidades medidas siguientes:

Energía de enlace: $\Delta E = 2.22$ MeV.

Spin nuclear: $i = 1$

Paridad nuclear: par

Momento dipolar magnético $\mu = +0.857\mu_n$

Momento cuadrupolar eléctrico: $q = +2.7 \times 10^{-31}$ m^2

Radio de la mitad del valor de la distribución de carga: $a = 2.1$ F

El hecho de que el deuterón posea un momento cuadrupolar eléctrico, q, quiere decir que su función de densidad de probabilidad no es esféricamente simétrica. Esto inmediatamente indica que el *potencial nucleónico*, que especifica la fuerza que actúa entre los dos nucleones, en sí no es esféricamente simétrica. El punto es que todos los potenciales esféricamente simétricos poseen eigenfunciones con $l = 0$ en sus estados base, y las funciones de densidad de probabilidad correspondientes a dichas eigenfunciones son todas esféricamente simétricas (un ejemplo es el potencial de Coulomb y el estado base, esféricamente simétrico, de un átomo con un electrón). Sin embargo, la desviación observada de la simetría esférica, no es grande.

Una medida de dicha desviación es la cantidad q/r'^2 (ver la figura 15-20); que tiene un valor de aproximadamente 6% si se toma r' como el radio de la mitad del valor de la distribución de carga, a. Los cálculos demuestran que si el deuterón se encuentra en un estado $l = 0$, el 96% del tiempo, se obtiene el momento cuadrupolar eléctrico medido, mientras que el 4% del tiempo se encuentra en un estado $l = 2$. Dicho estado mezclado también tendrá la paridad par que se mide ya que para ambos estados componentes la l es par. Como el spin nuclear del estado base medido es 1, ambos estados componentes deberán tener $J = 1$. En la figura 17-1 se muestran los diagramas de adición vectorial que ilustran las relaciones entre los números cuánticos l y j en ambos estados y demuestran que son esencialmente paralelos para los dos spin intrínsecos del protón y del neutrón y el número cuántico que especifica el impulso angular de spin

FIGURA 17-1
Diagramas de adición vectorial que muestran los números cuánticos del impulso angular de spin, orbital, y total en los dos estados componentes del neutrón. En el estado dominante $l = 0$. En ese estado, como $J = 1$ es necesario que $s = 1$, lo que en notación espectros cópica se designa $^3S_1$. En el estado menos probable, $l = 2$. Como $j = 1$ también es necesario que $s = 1$ en este estado. Dicho estado se designa $^3D_1$.

intrínseco total es $s = 1$. En notación espectroscópica, el estado dominante es $^3S_1$ y el estado menos probable $^3D_1$. (El superíndice proporciona el valor de $2s + 1$; la letra proporciona el valor de l, de modo que S implica $l = 0$, P indica $l = 1$, D quiere decir $l = 2$, etc.; el subíndice proporciona el valor de J.) Los cálculos también demuestran que esta mezcla de estados conduce al momento dipolar magnético medido $\mu = +0.857\mu_n$. El valor difiere por aproximadamente 3% de lo que se obtendría si el deuterón se encontrara en un estado $^3S_1$ puro, con los spin intrínsecos del protón y del neutrón esencialmente paralelos y sin movimiento orbital, ya que en ese estado sería nada más la suma de los momentos dipolares magnéticos del neutrón y del protón, a saber, $+2.7896\mu_n - 1.9103\mu_n = + 0.8793\mu_n$. A partir de estas consideraciones se concluye que el potencial nucleónico no es precisamente esféricamente simétrico, ya que no conduce a un estado base S puro para el deuterón. Sin embargo, es pequeña la cantidad de estado D con el que se mezcla, la asimetría del potencial debe ser pequeña. En la mayoría de los casos la asimetría puede ser ignorada.

Así pues, se considera al deuterón como un sistema en el que los nucleones se encuentran ligados en un estado $^3S_1$ de un potencial nucleónico esféricamente simétrico $V(r)$, donde r es la distancia entre sus centros. Este potencial especifica la fuerza que actúa entre los dos nucleones. Se obtiene alguna información acerca de ella demandando que la energía de su estado base proporciona una energía de amarre igual al valor medido $\Delta E = 2.22$ MeV. Se obtiene información adicional demandando también que la eigenfunción del estado base proporciona un radio de la mitad del valor de la distribución de carga igual al valor medido $a = 2.1$F. Estas dos partes de los datos no son suficientes para determinar la forma del potencial nucleónico, es decir, la dependencia radial de la función $V(r)$. Sin embargo, si se supone que $V(r)$ por simplicidad tiene la forma de un pozo cuadrado como el de la figura 17-2, entonces el radio r' y la profundidad V_0 pueden determinarse y son aproximadamente, 2F y 40 MeV respectivamente. Los número precisos serán citados más adelante tras haber introducido información experimental adicional capaz de determinar algo acerca de la forma del potencial. Asimismo se puede determinar que un potencial que ajuste los valores medidos tanto de ΔE y a tiene la propiedad de que su estado base en su único estado ligado, como se indica en la figura 17-2. Lo anterior concuerda con el hecho observado de que el deuterón no posee estados excitados ligados.

Por otra parte, en el estado ligado $^3S_1$ del deuterón, los spin del protón y del neutrón son esencialmente paralelos. Se sabe, que no existen deuterones ligados con spin nucleónicos esencialmente antiparalelos, es decir, en un estado $^1S_0$ ya que ninguno se ha encontrado con spin nuclear 0 que pudiera obtenerse en dicho estado. ¿Cuál es la razón de la ausencia de un estado ligado $^1S_0$? Una explicación es que el *potencial nucleónico es dependiente del spin, siendo apreciablemente más débil cuando dos nucleones interactúan con spin esencialmente antiparalelos (en un estado de singulete)*. Si el potencial es suficientemente débil para evitar que los nucleones se liguen de modo estable, entonces se puede explicar la ausencia del estado ligado $^1S_0$. (Un potencial unidimensional posee al menos un estado ligado, sin importar qué tan débil sea el potencial, ya que las eigenfunciones pueden extenderse hacia las regiones clásicamente excluídas en ambos lados de la región de enlace. Sin embargo, debido a la diferente geometría de

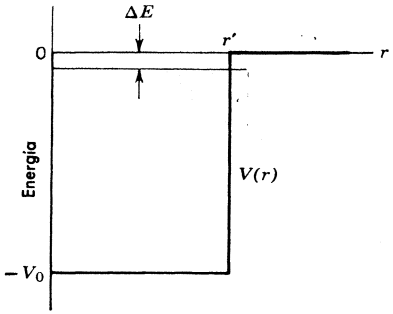


FIGURA 17-2
Pozo cuadrado de potencial de radio r' y profundidad V_0, y su eigenvalor para el estado base con energía de enlace ΔE. Para el deuterón, este estado es el único estado ligado del potencial.

la eigenfunción, un potencial tridimensional sólo podrá tener un estado ligado si es suficientemente fuerte. Esto puede verse en un examen de la forma de $rR(r)$ para el estado S más bajo de un pozo cuadrado tridimensional, como se muestra en la figura 15-17. Como $rR(r) = 0$ en $r = 0$, la función deberá tener suficiente curvatura dentro de la región de enlace para permitir su acoplamiento a una exponencial decreciente en la región excluída. A su vez, esto requiere que la región de enlace, para una anchura dada, sea suficientemente profunda). Evidencias cualitativas adicionales apoyando la idea de la dependencia con el spin del potencial nucleónico se encuentran en la ausencia de un estado ligado para un sistema de dos protones, o en un sistema de dos neutrones. En ambos sistemas, el principio de exclusión requiere que éste sea un estado $^1S_0$ donde los spin de los dos nucleónicos idénticos son esencialmente antiparalelos. En este estado el potencial es, presumiblemente, muy débil como para conducir a un enlace.

La evidencia cuantitativa de la dependencia con el spin del potencial nucleónico se obtiene en el análisis de datos relacionados con la dispersión de neutrones no ligados, de baja energía cinética por protones. Si las orientaciones de los spin de los neutrones en el haz incidente y de los protones en el blanco dispersor, son al azar, entonces los cuatro estados posibles de spin del sistema de dos nucleones serán igualmente probables. Estos nucleones estarán, generalmente (tres de cuatro veces) interactuando en uno de los tres estados $^3S_1$ (los estados de triplete en los que los spin nucleónicos son esencialmente paralelos y el spin total puede tener tres componentes diferentes de z: $-\hbar, 0, +\hbar$). Ocasionalmente (una vez de cada cuatro) los nucleones interactuarán en el estado $^1S_0$ (el estado de singulete en el que los spin nucleónicos son esencialmente antiparalelos, y el spin total sólo puede tener una componente de z igual a 0). La sección de dispersión total, σ, que es proporcional a la probabilidad total de que un neutrón sea dispersado por un protón, se muestra en la figura 17-3. Como algunas de las interacciones ocurren en el estado de singulete, estos datos proporcionan información que, cuando son analizados, demuestran que el potencial para un estado de singulete es aproximadamente 40% más débil que el potencial para un triplete. Es decir, ambos son pozos cuadrados con el mismo radio, pero la profundidad es aproximadamente 40% menor en el potencial para el estado de singulete. Por lo tanto, se concluye que el potencial nucleónico realmente sí depende de la orientación relativa de los spin de los dos nucleones interactuantes.

Esta información cuantitativa respecto a la dependencia con el spin se confirma analizando la dispersión de protones de baja energía por protones. Dicho análisis también proporciona evidencia adicional de que *el potencial nucleónico es independiente de la carga;* es decir, no distingue entre protones y neutrones. La evidencia es que el potencial nucleónico que concuerda con la sección de dispersión medida en el caso de dispersión neutrón-protón, también concuerda con la sección de dispersión medida para el caso protón-protón. Esto no quiere decir que las secciones de dispersión sean iguales. En la dispersión protón-protón, el potencial de Coulomb, que está presente además del potencial nucleónico, afecta la dispersión a bajo ángulo y el principio de incertidumbre afecta toda la dispersión, suprimiendo ciertos estados cuánticos.

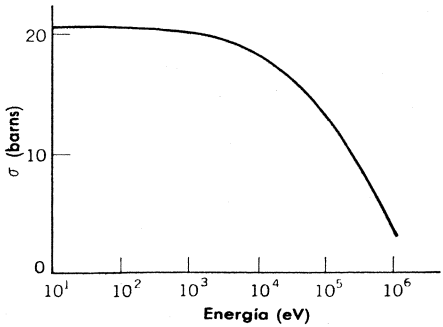


FIGURA 17-3
Valores medidos de la sección de dispersión total σ de neutrones por protones como función de la energía del neutrón incidente.

La dispersión de un nucleón de baja energía por otro nucleón, no proporciona información acerca de la forma del potencial nucleónico. Como se mide en un sistema de referencia en el que el centro de masas del sistema está estacionario, la dispersión es independiente del ángulo, o bien, isotrópica. En este sistema de referencia, la sección diferencial de dispersión, $d\sigma/d\Omega$, que es proporcional a la probabilidad de dispersión a varios ángulos, es igual para todos los ángulos. Esta sección diferencial de dispersión constante, sólo proporciona una parte de los datos experimentales-el valor medido de $d\sigma/d\Omega$. Esta única cantidad medida puede ser utilizada en la determinación de una sola cantidad teórica. La cantidad que así se determina es la intensidad del potencial. (Esto es $V_0 r'^2$ para un potencial de pozo cuadrado). La razón por la cual la dispersión es isotrópica en el llamado sistema de referencia del centro de masas, es que a muy bajas energías la longitud de onda de de Broglie, λ que describe la dispersión de nucleones es muy grande comparada con el radio r' del potencial que describe las fuerzas que producen la dispersión. Si $\lambda \gg r'$, entonces la separación en el ángulo de dispersión entre mínimos adyacentes del patrón de difracción es, de acuerdo con (15-4), $\theta \simeq \lambda/r' \gg 1$. Como el intervalo total del ángulo de dispersión es π, la desigualdad esencialmente indica que no existen mínimos. En otras palabras, para la onda, el potencial se ve como un punto, por lo que la dispersa isotrópicamente. Sin embargo, si la energía del nucleón dispersado es suficientemente grande de modo que λ sea menor que r', entonces $\theta \simeq \lambda/r' < 1$. En este caso, el patrón de dispersión presenta estructura y $d\sigma/d\Omega$ contiene información acerca de la forma del potencial que produce la dispersión. Por lo tanto, *sólo los nucleones de alta energía poseen suficiente poder de resolución para que sean útiles como sondas en el estudio de la forma del potencial nucleónico.* En el ejemplo 17-2 se demostrará que si se toma el radio del potencial como 2F, se puede esperar que la sección diferencial de dispersión, $d\sigma/d\Omega$, se desvíe de la isotropía cuando la energía cinética del nucleón incidente exceda, aproximadamente, 40 MeV.

Los primeros experimentos de dispersión neutrón-protón de alta energía fueron realizados a una energía cinética incidente del neutrón de 90 MeV. Se esperaba que proporcionaría información acerca de la dependencia radial del potencial nucleónico, sin embargo, como se verá más adelante, lo que realmente ilustraron fue un aspecto diferente de la forma del potencial nucleónico. Asimismo, se esperaba que la sección diferencial de dispersión, $d\sigma/d\Omega$, tendría la misma forma que un patrón de difracción rudimentario, con $d\sigma/d\Omega$ generalmente creciente para ángulos de dispersión decrecientes. La razón por la que se pensó que habría preferencia para dispersión a ángulos pequeños en direcciones hacia adelante, se indica en la figura 17-4. Si la profundidad del potencial nucleónico $V(r)$ es significativamente menor que la energía cinética del neutrón incidente, el impulso máximo que dicho potencial puede transferir al neutrón tiene una magnitud que es significativamente menor que la magnitud de su impulso inicial. Bajo estas circunstancias, no sería posible un cambio grande en la dirección del impulso del neutrón. La figura 17-5, muestra las $d\sigma/d\Omega$ medidas para dispersión neutrón-protón de 90 MeV. Siguiendo la convención, estos resultados están expresados en un sistema de

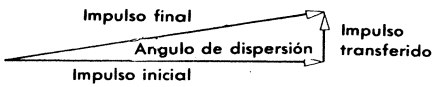


FIGURA 17-4
Ilustración de por qué el ángulo de dispersión debe ser pequeño si un nucleón es dispersado por un potencial que sólo puede transferir al nucleón un impulso de magnitud pequeña comparado con su impulso inicial. Esta es la situación que se esperaría si la energía cinética del nucleón fuera grande comparada con la profundidad del potencial.

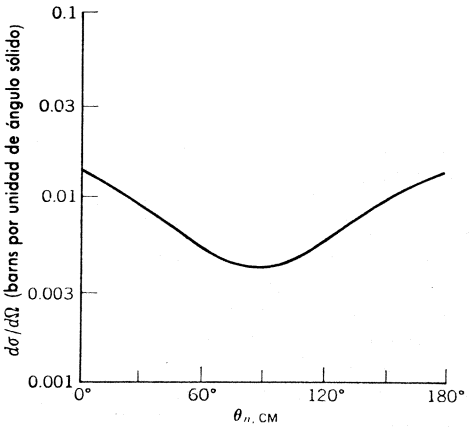


FIGURA 17-5
Valores medidos de la sección diferencial de dispersión, $d\sigma/d\Omega$ para neutrones con energía incidente de 90 MeV por protones. Los datos realmente se obtienen en un sistema de referencia donde el protón-blanco se encuentra inicialmente estacionario. En este caso, los datos han sido transformados a un sistema de referencia en el que el centro de masas está estacionario. La cantidad $\theta_{n,\,CM}$ es el ángulo de dispersión del neutrón en ese sistema.

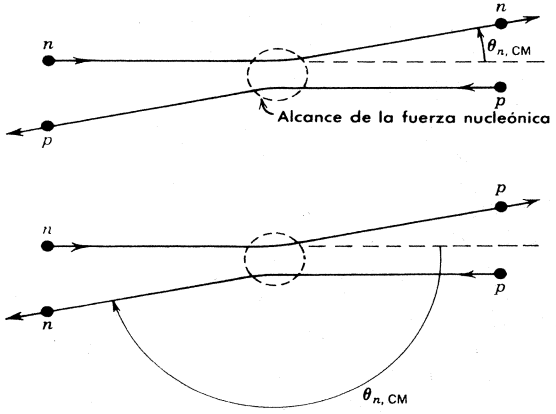


FIGURA 17-6
Arriba: Dispersión neutrón-protón vista en un marco de referencia en donde el centro de masas del sistema se encuentra en reposo. Si las energías cinéticas de los nucleones son grandes comparadas con la profundidad del potencial nucleónico, las transferencias de impulso son pequeñas y los ángulos de dispersión del neutrón y del protón también son pequeños. *Abajo:* Lo mismo, para una dispersión en la que un neutrón se cambia por un protón y viceversa cuando interactúan. A pesar de que las transferencias de impulso aún son pequeñas, los ángulos de dispersión son grandes, debido al intercambio.

referencia en el que el centro de masas del sistema neutrón-protón se encuentra estacionario. En la parte superior de la figura 17-6 se indica que en este sistema de referencia del centro de masas, el argumento que se ha seguido conduce a esperar una preferencia por dispersión a ángulos pequeños. Sin embargo, las medidas demuestran que *$d\sigma/d\Omega$ para la dispersión neutrón-protón es aproximadamente simétrica con respecto a un ángulo de dispersión de 90^0*. Por lo tanto, existe una pronunciada preferencia igual para dispersión a ángulos grandes.

En la parte inferior de la figura 17-6 se representa la interpretación física del origen de la preferencia observada para dispersión a ángulos grandes. *En aproximadamente la mitad de las dispersiones el neutrón se transforma en un protón y el protón se transforma en un neutrón,* cuando los dos nucleones se encuentran muy próximos entre sí. Cuando ocurre el intercambio, a pesar de que es pequeña la transferencia del impulso en cada dispersión, su efecto es el de producir una dispersión a ángulos grandes. En una sección posterior se verá que el neutrón se puede transformar en un protón emitiendo un mesón cargado y un protón se puede transformar en un neutrón óptico absorbiendo dicho mesón.

Una interpretación más formal de los resultados de los esperimentos de dispersión neutrón-protón, es que el potencial nucleónico V que produce la dispersión posee una forma que aproximadamente se puede escribir como

$$V \simeq \frac{V(r) + V(r)P}{2} \tag{17-1}$$

donde P es un *operador de intercambio* que transforma a un protón en un neutrón y a un neutrón en un protón, y $V(r)$ es el potencial nucleónico ordinario que se ha estudiado anteriormente. Ahora bien, el potencial nucleónico V entra en expresiones para la sección de dispersión a través del elemento de matriz

$$\psi_f^* V \psi_i$$

donde ψ_i es la eigenfunción para el sistema neutrón-protón inicial (antes de la dispersión), y ψ_f^* es el complejo conjugado de la eigenfunción para el sistema neutrón-protón final (después de la dispersión). Por lo tanto, resulta interesante considerar la cantidad

$$V\psi_i \simeq \left[\frac{V(r) + V(r)P}{2}\right] \psi_i = \frac{V(r)}{2}\psi_i + \frac{V(r)}{2} P\psi_i$$

Lo anterior puede escribirse como

$$V\psi_l \simeq \frac{V(r)}{2}\psi_l + \frac{V(r)}{2} P\psi_l \tag{17-2}$$

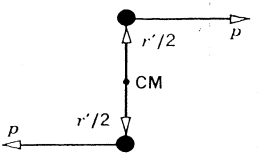
utilizando el número cuántico l para denotar el impulso angular orbital del sistema inicial. Como el intercambio del neutrón y protón de masas iguales es equivalente a un intercambio en los signos de las coordenadas que especifican sus posiciones relativas a un origen en su centro de masas a la mitad de la distancia entre ellos, la operación de intercambio es equivalente, bajo estas circunstancias particulares a la operación de paridad. Por lo tanto, la relación usual entre el número cuántico del impulso angular orbital y la paridad, (8-47), es aplicable y dice que

$$P\psi_l = (-1)^l \psi_l$$

Es decir, la paridad de una eigenfunción de un potencial esféricamente simétrico ψ_l es par si l es par e impar si l es impar. Consecuentemente, el operador de paridad (o intercambio) deja la eigenfunción invariante en el segundo término del miembro derecho de (17-2) si l es par, y la multiplica por un signo menos si l es impar. Entonces, se tiene

$$V\psi_l \simeq \frac{V(r)}{2}\psi_l + \frac{V(r)}{2} P\psi_l = \frac{[1 + (-1)^l]}{2} V(r)\psi_l$$

FIGURA 17-7
Dos nucleones, cada uno con impulso lineal de magnitud p que se pasan a una distancia de r', entre sí. Cada uno tiene un impulso angular orbital de magnitud $pr'/2$ con respecto al centro de masas. La magnitud del impulso angular orbital del sistema con dos nucleones es $L = pr'$.



A partir de este resultado se puede ver que el potencial nucleónico puede ser escrito aproximadamente, sin utilizar el operador de intercambio, en la forma denominada *potencial de Serber*,

$$V \simeq \frac{[1 + (-1)^l]}{2} V(r) \tag{17-3}$$

Obsérvese que $V \simeq 0$ si l es impar. Se concluye que *el potencial nucleónico depende fuertemente de impulso angular orbital de los dos nucleones que interactúan, con respecto a su centro de masas. El potencial es aproximadamente cero cuando el número cuántico del impulso angular orbital, l, tiene un valor impar*. (Más adelante se verá que $V \simeq 0$ para l impar sólo si su efecto se promedia para todos los estados cuánticos correspondientes a ese valor de l, como es el caso en la mayoría de las situaciones).

En la figura 17-7 se ilustra un argumento clásico basado en el sistema de referencial del centro de masas, que demuestra que existe una relación entre el valor máximo posible del impulso angular orbital L y el impulso lineal p, para un sistema de dos nucleones que interactúan. La relación es $L \simeq pr'$, donde r' es la máxima separación a la que los nucleones puedan interactuar, la cual es el alcance de la fuerza nucleónica o el radio del potencial nucleónico. Dado que L está relacionada con el número cuántico l por medio de la ecuación $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, resulta fácil de estimar, para un valor supuesto de r', el valor máximo posible, $l_{\max}$ del número cuántico en términos de los impulsos y energías cinéticas de los nucleones.

Ejemplo 17-1. Dos nucleones interactúan por medio de una fuerza nucleónica de alcance $r' = 2.0$F, en un estado tal que el número cuántico del impulso angular asume su valor máximo posible. Si este valor es $l_{\max} = 1$, ¿cuál deberá ser la energía cinética de cada nucleón en el sistema de referencia del centro de masas?. ¿La energía cinética total en ese sistema de referencia? ¿La energía cinética del nucleón incidente (en un haz) en un sistema de referencia donde el nucleón con el que interactúa se encuentra inicialmente estacionario (en un blanco)?

Se tiene

$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

con $l = l_{\max} = 1$. Por lo tanto

$$L = \sqrt{1(1+1)}\,\hbar = \sqrt{2}\,\hbar$$

Asimismo,

$$L \simeq pr'$$

o bién,

$$p \simeq \frac{L}{r'} = \frac{\sqrt{2}\,\hbar}{r'}$$

Así pues la energía cinética de cada nucleón en el sistema de referencia del centro de masas (CM) es

$$K = \frac{p^2}{2M} \simeq \frac{2\hbar^2}{2Mr'^2}$$

$$\simeq \frac{(1.05 \times 10^{-34}\,\text{joule-seg})^2}{1.7 \times 10^{-27}\,\text{kg} \times (2.0 \times 10^{-15}\,\text{m})^2} = 1.6 \times 10^{-12}\,\text{joule}$$

$$= 10\ \text{MeV}$$

La energía cinética total en ese sistema de referencia entonces es

$$K_{\text{total CM}} = 2K \simeq 20\ \text{MeV}$$

Como las partículas que interactúan tienen masas iguales, es fácil demostrar que la energía cinética de la que se mueve, en un sistema de referencia en el que la otra se encuentra inicialmente en reposo, es el doble de la energía cinética en el sistema de referencia del centro de masas. Por lo tanto, la enegía cinética del nucleón incidente es

$$K_{\text{incidente}} = 2K_{\text{total CM}} \simeq 40\ \text{MeV}$$ ◀

Ejemplo 17-2. Demostrar que la condición $l_{\max} = 0$ es equivalente a la condición $\theta \simeq \lambda/r' \gg 1$ que requiere que la sección diferencial de dispersión $d\sigma/d\Omega$ sea isotrópica.

En relación con el cálculo del ejemplo 17-1, obsérvese que si la energía cinética K de cada nucleón en el sistema de referencia del centro de masas es menor que aproximadamente 10 MeV, entonces cada uno tendrá un impulso p que es

$$p < \frac{\sqrt{2}\,\hbar}{r'} = \frac{h}{\sqrt{2}\pi r'}$$

o bien

$$\frac{h}{pr'} > \sqrt{2}\pi$$

Utilizando la relación de de Broglie para evaluar λ, la longitud de onda del nucleón, a partir de sus impulsos p, se obtiene

$$\frac{\lambda}{r'} > \sqrt{2}\pi$$

o bien

$$\frac{\lambda}{r'} \gg 1$$

De acuerdo con (15-4), la separación entre mínimos adyacentes en el patrón de dispersión es $\theta \simeq \lambda/r'$, se tiene por lo tanto,

$$\theta \simeq \frac{\lambda}{r'} \gg 1$$

Como se mencionó en páginas anteriores, esta desigualdad significa que no hay mínimos y que la sección diferencial de dispersión es isotrópica. Sin embargo, en el ejemplo 17-1 se vio que $K \simeq 10$ MeV es la condición para que $l_{\max} = 1$ (suponiendo que al alcance de las fuerzas nucleónicas es $r' = 2$ F). Así pues, para $K < 10$ MeV, sólo se puede tener $l_{\max} = 0$. Entonces, se ha demostrado que $l_{\max} = 0$ es equivalente a $\theta \simeq \lambda/r' \gg 1$.

En el ejemplo 17-1 se concluyó que cuando la energía cinética de cada nucleón en el sistema de referencia del centro de masas es aproximadamente 10 MeV, la energía cinética del nucleón incidente, en el sistema de referencia en el cual el nucleón-blanco se encuentra inicialmente en reposo, tiene un valor

de aproximadamente 40 MeV. Por lo tanto, también se puede concluir que podría esperarse que $d\sigma/d\Omega$ se desviara de la isotropía sólo cuando la energía cinética del nucleón incidente es igual, o excede, aproximadamente 40 MeV. ◀

En el ejemplo 17-1 se demuestra que, para un potencial nucleónico de radio $r' = 2$ F, se tiene $l_{max} = 0$ a menos que la energía cinética de cada nucleón del par en interacción exceda aproximadamente 10 MeV en el sistema de referencia del centro de masas. Cálculos similares demuestran que $l_{max} = 1$ a menos que estas energías excedan 30 MeV, aproximadamente y $l_{max} = 2$ a menos que excedan aproximadamente 60 MeV. (Todos estos números son sólo aproximaciones ya que han sido obtenidos de argumentos semiclásicos). Ahora bien, si se considera a un par de nucleones en un núcleo, sus energías cinéticas en un marco de referncia fijo a su centro de masas, generalmente no exceden 30 MeV. Por consiguiente, interaccionan entre sí, en el caso más usual, en estados $l = 0$ y $l = 1$. Sin embargo, el potencial de Serber, (17-3) es aproximadamente cero para $l = 1$. Así pues, los nucleones en un núcleo realmente interactúan fuertemente entre sí en sólo la mitad de los estados cuánticos que las consideraciones relativas al impulso angular (y al principio de exclusión, si son de la misma especie) permitirían contribuir, en otras circunstancias, a las interacciones totales. Esta propiedad del potencial nucleónico permite la saturación de las fuerzas nucleónicas suprimiendo las fuerzas nucleónicas de atracción en la mitad de las interacciones; pero no es suficiente. Para obtener la saturación-característica que como se indicó al principio de esta sección es responsable de una de las propiedades más básicas de los núcleos -es necesario que algunas de las fuerzas nucleónicas sean de repulsión. Es decir, debe existir una *parte de repulsión* en el potencial nucleónico.

El estudio de la dispersión protón-protón a energías suficientemente altas ha demostrado que la dependencia radial del potencial nucleónico es tal que posee una región de repulsión en su centro. En la figura 17-8 se presenta la sección diferencial de dispersión, $d\sigma/d\Omega$, medida en el sistema de referencia del centro de masas, para la dispersión de protones incidentes con energía cinética de 330 MeV por un blanco con protones. Se grafican únicamente ángulos de dispersión de 0° a 90°. La simetría del sistema de dos protones demanda que $d\sigma/d\Omega$ sea simétrica respecto de 90°, independientemente de cual sea la forma del potencial nucleónico, ya que si un protón es dispersado a un ángulo θ el otro deberá ser dispersado a un ángulo de $180° - \theta$. Para ángulos menores que aproximadamente 10°, $d\sigma/d\Omega$ presenta una dependencia angular muy rápida como la dispersión de Coulomb. En este intervalo angular la distancia de máximo acercamiento en las dispersiones es mayor que el intervalo de las fuerzas nucleónicas. A ángulos mayores las dispersiones implican colisiones rasantes en las que dominan fuerzas nucleónicas y *se encuentra que $d\sigma/d\Omega$ para la dispersión protón-protón es esencialmente isotrópica.*

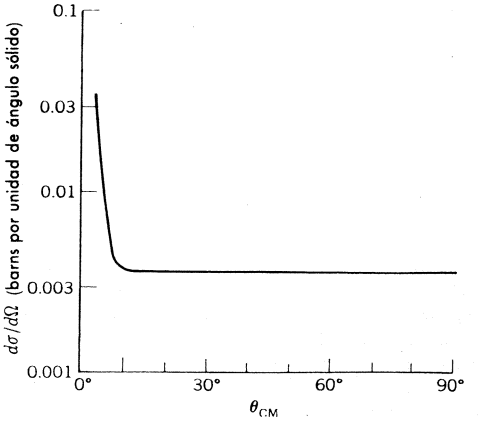


FIGURA 17-8
Valores medidos para la sección diferencial de dispersión $d\sigma/d\Omega$ con respecto al centro de masas, para la dispersión protón-protón. La energía de los protones incidentes es 330 MeV.

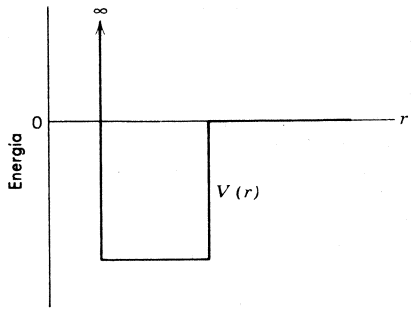


FIGURA 17-9
Potencial nucleónico con una coraza de repulsión infinitamente intensa dentro de un pozo cuadrado de atracción.

Jastrow demostró que la sorprendente isotropía en la dispersión protón-protón de alta energía, implica que *existe una fuerte coraza de repulsión en el potencial nucleónico.* Es decir, el potencial tiene una dependencia radial parecida a la que se indica en la figura 17-9. No es difícil entender cualitativamente los puntos esenciales del argumento de Jastrow. A una energía cinética incidente de 330 MeV, la energía cinética de cada uno de los protones en el sistema de referencia de su centro de masas es 82 MeV, y $l_{\max} = 3$. Por lo tanto, los dos protones en la dispersión sólo pueden interactuar en estados de impulso angular orbital dados por $l = 0, 1, 2, 3$. Sin embargo, como el potencial de Serber es aproximadamente cero para $l = 1$ y 3, las interacciones significativas sólo pueden ocurrir en estados con $l = 0$ y 2. *Si* sólo estuviese implicado el estado $l = 0$, $d\sigma/d\Omega$ sería definitivamente isotrópica ya que la dispersión sería igual que si se tuviera $l_{\max} = 0$, lo que quiere decir $\theta \simeq \lambda/r' \gg 1$. Sin embargo, en este caso la magnitud de $d\sigma/d\Omega$ sólo podría ser aproximadamente la mitad de la magnitud que realmente se observa. De hecho, la isotropía de $d\sigma/d\Omega$ es el resultado de la interferencia destructiva entre las ondas dispersadas en una interacción en el estado $l = 0$ y las ondas dispersadas en una interacción en el estado $l = 2$. La interferencia suprime la tendencia, discutida anteriormente, de que $d\sigma/d\Omega$ sea grande a ángulos pequeños. En la figura 17-10 se indica cómo un potencial con

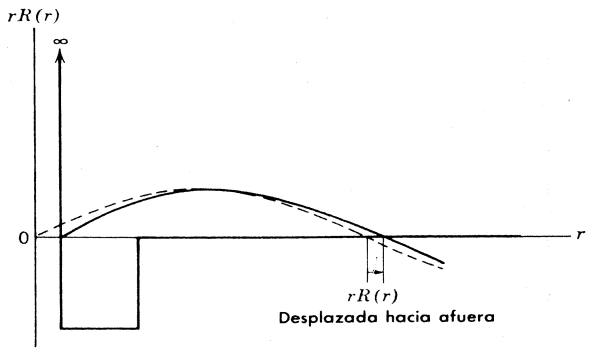


FIGURA 17-10
Efecto de la coraza de repulsión del potencial sobre la dependencia radial de la coordenada radial, r, por la eigenfunción de la parte radial, $R(r)$, correspondiente a la eigenfunción para el estado $l = 0$ en la dispersión protón de alta energía-protón. La curva continua muestra $rR(r)$ en presencia del potencial y, por comparación, la curva discontinua muestra lo que sería en ausencia de potencial. Dado que la energía del protón incidente es grande comparada con la profundidad de la región de atracción del potencial, el efecto de la coraza de repulsión domina y $rR(r)$ es jalada hacia afuera.

una núcleo de repulsión, la altura de la cual es mucho mayor que la energía cinética del protón incidente, afecta la eigenfunción correspondiente al estado $l = 0$. La región de respulsión "empuja" a la eigenfunción como si estuviera en el extremo de un pozo infinito, y la región atractiva "jala" la eigenfunción ya que esta aumenta su curvatura. Si la energía del protón incidente es grande comparada con la profundidad de la región de atracción, el efecto de esta región es pequeño y el resultado neto es que la eigenfunción correspondiente al estado $l = 0$ sea empujada hacia afuera. En la figura 17-11 se muestra el efecto del potencial sobre la eigenfunción correspondiente al estado $l = 2$. Como para r pequeña todas las eigenfunciones presentan el comportamiento r^l dado por (7-32), la eigenfunción con $l = 2$ tiene un valor tan pequeño en toda la región de respulsión cercana a $r = 0$, que dicha región prácticamente no la afecta. Esta eigenfunción es muy pequeña para r pequeña independientemente de que la región de repulsión esté o nó presente. Consecuentemente, la región de atracción es la única que tiene algún efecto sobre la eigenfunción del estado $l = 2$ y por lo tanto, la eigenfunción es jalada hacia adentro por el potencial. La interferencia destructiva que conduce a una $d\sigma/d\Omega$ isotrópica se debe a que la eigenfunción del estado $l = 0$ es empujada hacia afuera mientras que la eigenfunción del estado $l = 2$ es jalada hacia adentro. Si el potencial nucleónico fuera puramente de atracción, ambas eigenfunciones sólo podrían ser jaladas hacia adentro.

Experimentos recientes de dispersión de electrones de alta energía por deuterones proporcionan una evidencia completamente independiente de la existencia de una coraza de repulsión intensa en el potencial nucleónico. Estos experimentos demuestran que existe un agujero en el centro de la distribución de carga del deuterón. Esto quiere decir, que el protón evita el centro del deuterón, presumiblemente por la repulsión tan intensa que experimenta si trata de aproximarse demasiado al neutrón. Los análisis de los experimentos de dispersión tanto electrón-deuterón como protón-protón, indican que el radio de la coraza de repulsión es aproximadamente 0.5F.

El núcleo de repulsión en el potencial nucleónico es el factor más importante responsable de la saturación de las fuerzas nucleónicas. En un núcleo, los núcleos en los potenciales nucleónicos agregan contribuciones positivas grandes a la energía total, si los nucleones se encuentran empaquetados con mucha proximidad. Esta es la razón por la que los nucleones mantienen un espaciamiento promedio centro-a-centro dado por la densidad de masa nu-

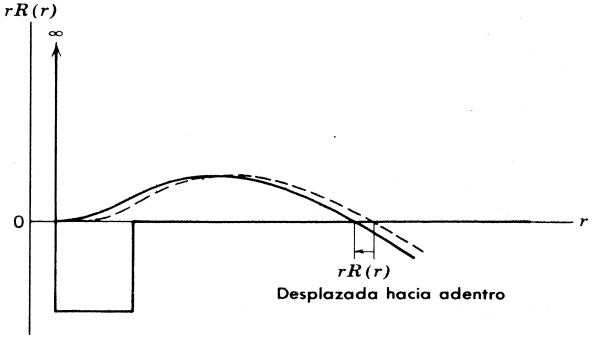


FIGURA 17-11
Efecto de una coraza de repulsión del potencial sobre *rR(r)* para la eigenfunción del estado $l = 2$ en la dispersión de protones de alta energía con protones. La curva continua muestra *rR(r)* en presencia del potencial y la curva discontinua muestra como sería en ausencia del potencial. Ya que *rR(r)* es negligiblemente pequeña en el radio de la coraza aún en ausencia del potencial ya que $R(r) \propto r^l$, *el efecto de la* coraza de repulsión es negligente. Por lo tanto, la región de atracción dominada y $rR(r)$ es jalada hacia adentro.

cleónica medida, de aproximadamente 1.2F. A este espaciamiento, un nucleón dado sólo puede interactuar con un número limitado de otros nucleones, ya que el alcance de las fuerzas nucleónicas es aproximadamente 2F, y por lo tanto, las fuerzas nucleónicas se saturan. Si no existiera una región de repulsión en los potenciales nucleónicos, las regiones de atracción ocasionarían que el núcleo se colapsara hasta que sus dimensiones lineales fueran aproximadamente iguales al alcance de las fuerzas nucleónicas. Entonces, cada nucleón interaccionaría con todos los demás nucleones y la energía de enlace por nucleón, $\Delta E/A$, sería aproximadamente proporcional a A.

Se encontró que el potencial nucleónico depende del número cuántico s que especifica el impulso angular de spin de un sistema de dos nucleones (i.e., independientemente de que se encuentren en estados de singulete o triplete), y que también depende del número cuántico l que especifica el impulso angular orbital del sistema. Algunos experimentos demuestran que el potencial también depende del número cuántico j y especifica el impulso angular total del sistema. Otra forma de expresar lo anterior es que el potencial no sólo depende del impulso angular de spin **S** y del impulso angular orbital **L**, sino también de su producto **S. L** que determina la magnitud del impulso angular total **J**. Por lo tanto, *el potencial nucleónico contiene un término spin-órbita, proporcional a* **S. L.** Dicho término hace que el potencial nucleónico sea de mayor atracción si **S. L.** es positivo y de mayor repulsión si es negativo, igual que en el caso para el término spin-órbita del potencial nuclear en el modelo de capas. Los términos spin-órbita nuclear y nucleónico están relacionados, sin embargo dicha relación todavía no se entiende completamente. Los experimentos a los que básicamente se refieren implican la dispersión de un haz de nucleones con spins alineados, por un blanco de nucleones con spins alineados. Lo anterior permite interacciones en diferentes estados cuánticos, con diferente impulso angular de spin, orbital y total, que serán investigados separadamente.

Esta sección se concluye resumiendo lo que se conoce acerca de las fuerzas nucleónicas. Desde luego que lo primero que se puede decir es que son muy complicadas. Cuando un nucleón, digamos, de 200 MeV de energía cinética interacciona con otro nucleón, el sistema podrá encontrarse en alguno de los siguientes estados cuánticos: $^1S_0$, $^3S_1$, $^1P_1$, $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$, $^1D_2$, $^3D_1$, $^3D_2$, $^3D_3$. El potencial nucleónico es diferente en cada uno de estos estados y así mismo en cada uno de ellos, su forma implica una dependencia radial bastante complicada así como desviaciones de la simetría esférica. Las únicas simplificaciones son:

1. El potencial nucleónico es independiente de la carga, por lo que no depende de las especies de los nucleones que interactúan.

2. El principio de exclusión prohibe la interacción en ciertos estados cuánticos entre nucleones de la misma especie. En particular, los estados $^3S_1$, $^1P_1$, $^3D_1$, $^3D_2$, $^3D_3$ se excluyen de la lista antes citada en el caso de interacciones neutrón-neutrón y protón-protón. La razón es

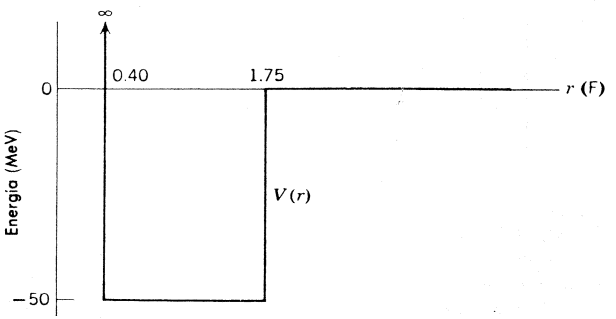


FIGURA 17-12
Dependencia radial de un potencial nucleónico, singulete, con l par en concordancia razonable con el experimento.

que si la eigenfunción espacial para un sistema de dos nucleones idénticos es simétrica en un intercambio de marcas (l par), entonces la eigenfunción de spin debe ser asimétrica ante un intercambio tal (singulete); y si la eigenfunción espacial es asimétrica (l impar), la eigenfunción de spin deberá ser simétrica (triplete).

3. El efecto neto de todas las interacciones en el estado P es muy pequeño. Sin embargo, experimentos con spins alineados demuestran que ésto se debe, en parte, a interferencias destructivas en las interacciones provenientes de diferentes estados P y que las interacciones en estados P individuales no son tan pequeñas.

Si es satisfactorio describir de modo aproximado sólo sus propiedades más importantes, entonces, las fuerzas nucleónicas no son tan complicadas. Las figuras 17-12 y 17-13 proporcionan cuantitativamente las dependencias radiales de los potenciales nucleónicos para estados cuánticos con l par. La primera figura muestra el potencial para estados de singulete (spins nucleónicos esencialmente antiparalelos), y la segunda muestra el potencial más intenso para los estados de triplete (spins nucleónicos esencialmente paralelos). Con estos dos potenciales, y con potencial cero para todos los estados cuánticos con l impar, los resultados que se obtienen están en concordancia razonable con todas las propiedades del deuterón (excepto su momento cuadrupolar eléctrico) y todos los datos de dispersión nucleónica hasta varios cientos de MeV (excepto los datos con spins alineados).

En la figura 17-13 también se muestra el eigenvalor y la dependencia radial de la eigenfunción correspondiente al único estado ligado del potencial del triplete, es decir, el deuterón. Obsérvese que la región de atracción es apenas suficientemente intensa para sobreponer el efecto de la coraza de repulsión y conducir a una ligadura. Como consecuencia, existe una alta probabilidad de que los dos nucleones en el deuterón posean una separación mayor que el alcance de las fuerzas nucleónicas.

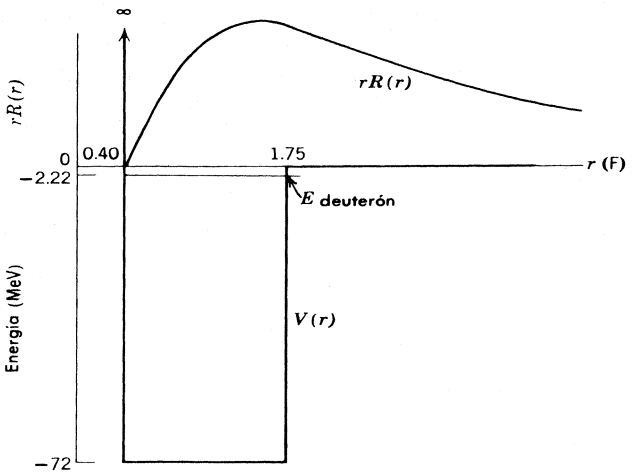


FIGURA 17-13

Dependencia radial de un potencial nucleónico, triplete, l par, en concordancia razonable con el experimento. También se muestran el eigenvalor y la cantidad $rR(r)$ para la eigenfunción del estado ligado único del potencial en -2.22 MeV. este estado, que es el deuterón se encuentra apenas ligado y $rR(r)$ apenas si alcanza un máximo dentro de la región de atracción (compárese con la figura 17-10). El cuadrado de $rR(r)$ es $r^2R^*(r)R(r)$ que es la densidad de probabilidad radial que especifica la probabilidad de encontrar a los dos nucleones en el deuterón con una separación cercana a r.

Desde luego, que en la naturaleza los potenciales nucleónicos no pueden tener la abrupta dependencia radial de los potenciales simplificados que se muestran en la figura 17-12 y 17-13. En una sección subsiguiente, se verá que la teoría mesónica predice algunas cosas acerca del comportamiento de los potenciales con radios relativamente grandes y que demuestran que el umbral de la región de atracción en realidad, debería ser bastante gradual.

17-3 Isospín

En la figura 17-14 se muestran esquemáticamente los niveles de energía más bajos para los tres sistemas de dos nucleones posibles: el dineutrón ${}^0n^2$; el deuterón ${}^1H^2$; y el diprotón ${}^2He^2$. El principio de exclusión sólo permite al deuterón tener un nivel de spin de triplete, denotado $s = 1$ y debido a la dependencia con el spin de la fuerza nuclear, este es el único nivel que se encuentra a una energía suficientemente baja para estar ligado. Sin embargo, los tres sistemas poseen un nivel de spin de singulete ligeramente no ligado, denotado $s = 0$. Debido a la independencia de la carga de la fuerza nucleónica, el nivel $s = 0$ se encuentra a la misma energía en todos los sistemas, excepto por el pequeño efecto de la energía de repulsión de Coulomb que se encuentra presente en el diprotón únicamente. La simetría que es evidente en este conjunto de diagramas de niveles de energía y que es aún más evidente en otros conjuntos que se verán después, puede ser descrita de modo muy conveniente por medio del concepto de *isospin, T.*

Como su nombre lo implica, el isospín posee propiedades matemáticas que son similares a las que se conocen al estudiar el spin. Sin embargo, no tiene una relación física directa con el spin. Se utiliza para identificar niveles de energía relacionados o estados cuánticos, en conjuntos de *isóbaros;* es decir, en conjuntos de sistemas que tienen todos el mismo número A de nucleones. Para el conjunto que se muestra en la figura 17-14, se dice que el nivel más bajo es un isospín singulete, denotado $T = 0$, y los tres niveles relacionados se dice que forman un triplete isospín, denotado $T = 1$. La palabra triplete resulta apropiada, puesto que hay tres niveles relacionados y porque asociada con T se encuentra una componente, denotada T_z, que puede asumir los tres valores $T_z = -1, 0, +1$ cuando $T = 1$. La componente T_z se utiliza para identificar un nivel particular en un multiplete isospín, especificando la relación entre el número Z de protones y el número N de neutrones para el isóbaro particular al que pertenece el nivel. La relación es

$$T_z = \frac{Z - N}{2} \tag{17-4}$$

En la figura 17-14 los tres niveles $T = 1$ se denotan por $T_z = (0 - 2)/2 = -1$ para el dineutrón, $T_z = (1 - 1)/2 = 0$ para el deuterón y $T_z = (2 - 0)/2 = +1$ para el diprotón . Para el nivel singulete isospín, $T = 0$, existe un sólo valor posible de T_z, a saber, el valor $T_z = 0$ que corresponde al deuterón.

En general la relación entre el valor de T y los valores posibles de T_z es

$$T_z = -T, -T + 1, \ldots, +T - 1, +T \tag{17-5}$$

Desde luego, esto es muy análogo a la relación matemática entre el número cuántico que describe cualquier vector de impulso angular, incluyendo el vector de spin, y los valores posibles del número cuántico que describe su componente z. Sin embargo, debe hacerse énfasis

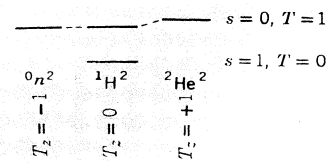


FIGURA 17-14
Ilustración del patrón formado por los niveles de energía más bajos de los tres sistemas posibles con dos nucleones.

en que el isospín *no* es un vector en algún espacio físico, con una componente a lo largo de un eje de coordenadas en ese espacio. En su lugar, se trata de un construcción matemática que sólo existe en algún espacio imaginario. De cualquier modo, es muy útil en la descripción de las propiedades simétricas de sistemas que contienen el mismo número de nucleones, que resulta de la forma simétrica en que el principio de exclusión trata a los nucleones idénticos de cualquiera de las especies y la forma simétrica en que la fuerza nucleónica, independiente de la carga, trata a todos los nucleones.

Un sistema que contiene un sólo nucleón posee $T = 1/2$, siendo los dos valores posibles de T_z, $T_z = -1/2, +1/2$. La primera posibilidad de acuerdo con (17-4), describe los neutrones para los cuales $(Z - N)/2 = (0 - 1)/2 = -1/2$, y el segundo describe el protón para el cual $(Z - N)/2 = (1 - 0)/2 = +1/2$. El isospín permite que se hable del neutrón y del protón como dos manifestaciones relacionadas de la misma partícula, el *nucleón* con $T = 1/2$. En una de ellas, llamada neutrón, $T_z = -1/2$; en la otra, llamada protón $T_z = +1/2$. Esto es como decir que un protón con spin "hacia arriba" es la manifestación $m_s = +1/2$ del protón $s = 1/2$, y el protón con spin "hacia abajo" es la manifestación $m_s = -1/2$ de esa partícula. Desde este punto de vista, las propiedades de intercambio de etiquetas mecánico-cuánticas de un sistema que contiene varios nucleones, se pueden expresar de modo muy general diciendo que si la eigenfunción total del sistema es un producto de una eigenfunción espacial, de una eigenfunción de spin, y de una eigenfunción de isospín, la simetría de cada una de ellas debe ser tal que en un intercambio de etiquetas de cualquiera dos partículas, la eigenfunción total será antisimétrica ya que los nucleones son fermiones. Como se aplicó a los niveles del sistema de dos nucleones de la figura 17-14, como para todos estos niveles $l = 0$, todos los estados correspondientes tendrán eigenfunciones espaciales simétricas. Así pues, para cada uno de ellos, una eigenfunción de spin simétrica deberá estar asociada con una eigenfunción de isospín asimétrica, o viceversa. Debido a sus propiedades matemáticas análogas, tanto del spin como del isospín, un estado de singulete se describe con una eigenfunción asimétrica mientras que en un estado de triplete se describe con una eigenfunción simétrica. Por lo tanto, los niveles de spin singulete ($s = 0$) deberán tener isospin triplete ($T = 1$), y el nivel de spin triplete ($s = 1$) deberá tener un singulete de isospín ($T = 0$), como se demuestra examinando la figura.

El poder del isospín en la identificación de estados cuánticos relacionados con conjuntos de sistemas que contienen gran número de nucleones, se muestra en la figura 17-15. En la figura se muestran esquemáticamente algunos de los niveles de energía más bajos del conjunto de isóbaros $^5B^{14}$, $^6C^{14}$, $^7N^{14}$, $^8O^{14}$, y $^9F^{14}$. Los llamados niveles *análogamente isobáricos* de un multiplete de isospín particular se denotan por T y T_z como anteriormente. Todos los niveles análogamente isobáricos poseen la misma energía, excepto por el pequeño aumento sistemático en sus energías al aumentar T_z, debido al aumento en la energía de repulsión de Coulomb conforme aumenta Z. La razón es que las eigenfunciones totales correspondientes a cada

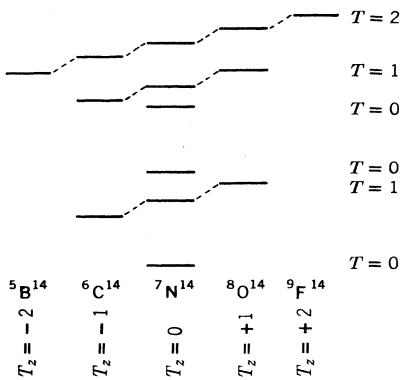


FIGURA 17-15
Niveles de energía más bajos de los isóbaros con $A = 14$. Obsérvese que la posición de los niveles de energía del estado base trazan parábolas, que para los estados base de los núcleos con $A = 14$, se discuten en relación con el decaimiento β.

sistema son todas soluciones idénticas (si se ignoran efectos de Coulomb) de una ecuación de Schrödinger para las mismas fuerzas nucleónicas ya que dicha fuerza nucleónica no depende de T_z puesto que es independiente de la carga. Sin embargo, la fuerza nucleónica sí depende de T puesto que es dependiente del spin. Esto se vio primeramente como una dependencia del spin; ahora se toma en cuenta que los requisitos para el intercambio de etiquetas significan también una dependencia con el isospín. La naturaleza de la dependencia del spin es tal que el estado con la T menor tiene los niveles de energía más bajos posibles para el conjunto de sistemas. Esto se puede ver tanto en la figura 17-15 como en la figura 17-14.

La afirmación de que las energías resultantes de la fuerza nucleónica, o interacción, no dependen de T_z sino sólo de T, es consistente con la afirmación de que el isospín T se conserva en procesos que implican esta interacción. Para aclarar lo anterior, compárese la afirmación de que el impulso angular total J se conserva en procesos que implican una interacción esféricamente simétrica $V(r)$, con la afirmación de que las energías resultantes de esta interacción no dependen de su componente J_z sino sólo de su magnitud J. Sin embargo, la conclusión de que el isospín se conserva en la interacción nucleónica es de mayor generalidad que la conclusión, basada en experimentos independientes de la carga, de que la interacción nucleónica depende de T pero no de T_z. Por lo tanto, requiere verificación experimental adicional. Más adelante se verá que la física de partículas proporciona muchas evidencias para esta verificación. Evidencia de la física nuclear se encuentra, por ejemplo, en la reacción

$$^1H^2 + {}^8O^{16} \rightarrow {}^7N^{14} + {}^2He^4$$

En todas las situaciones experimentales, los núcleos incidente y blanco, $^1H^2$ y $^8O^{16}$ se encuentran en sus estados base. Si la energía del núcleo incidente no es muy alta el núcleo producto $^2He^4$ también deberá estar en su estado base ya que su primer estado excitado se encuentra a una energía mayor que 20 MeV. Estos tres núcleos tienen $T_z = 0$ en todos los estados, y en su estado base tienen el valor mínimo de T consistente con esta T_z, a saber, $T = 0$. Lo mismo se aplica al estado base del núcleo residual $^7N^{14}$. Sin embargo, como se ve en la figura 17-15 el primer estado excitado de $^7N^{14}$ posee $T = 1$. En lo que respecta a la conservación de energía, impulso angular, o paridad, la reacción podría producir $^7N^{14}$ tanto en su estado base como en su primer estado excitado. La observación experimental de que dicha reacción sólo se produce en el estado base es una buena evidencia para la conclusión de que *la interacción nucleónica conserva el isopín T.*

17.4 Piones

En secciones precedentes se ha presentado una descripción de las propiedades de las fuerzas nucleónicas que se observan experimentalmente. A pesar de que se utilizó teoría en la descripción, esta fue esencialmente utilizada para correlacionar las observaciones experimentales y no para explicar su origen básico. Sin embargo, existe una teoría que ha tenido éxito para explicar cómo ciertas propiedades de las fuerzas nucleónicas resultan de atributos más fundamentales de la naturaleza. Esta es la *teoría mesónica* que se originó con el trabajo de Yukawa en 1935.

Yukawa propuso que un nucleón emite frecuentemente una partícula con masa en reposo apreciable, hoy llamada *mesón* π *o pión.* Esta partícula se mantiene cercana al nucleón en el llamado *campo del mesón* π por un tiempo muy corto siendo después absorbida por el nucleón. Durante el proceso el nucleón mantiene su masa en reposo normal, de modo que cuando sucede, se viola la ley de conservación de la masa-energía, ya que hay más masa en reposo presente que la que había antes de que fuera emitido el mesón π o después de ser absorbido. Sin embargo,el principio de incertidumbre energía-tiempo demuestra que dicha violación no es imposible si su duración es suficientemente pequeña. Desde luego que, el mesón π no puede escapar permanentemente del nucleón ya que en ese caso se violaría permanentemente la ley de

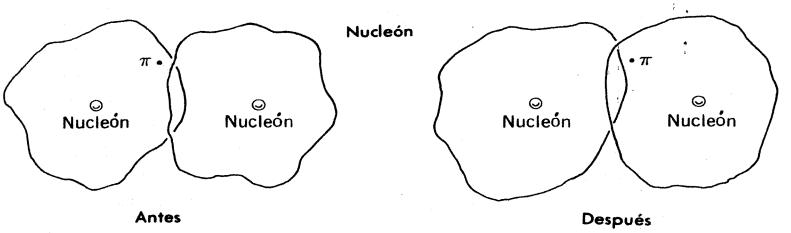


FIGURA 17-16
Representación muy burda del intercambio de un mesón π entre los campos de dos nucleones en interacción.

conservación de masa-energía. Sin embargo, si dos nucleones se encuentran suficientemente próximos para que sus campos mesónicos se traslapen, es posible que un mesón π abandone un campo y se una al otro, sin estar cambiando permanentemente la energía total del sistema de dos nucleones. Dicha interacción entre los campos se ilustra burdamente en la figura 17-16. En la interacción, el impulso que lleva el mesón π se transfiere de un campo al otro y por lo tanto, de un nucleón al otro. Sin embargo, si se transfiere impulso el efecto es igual que si hubiera una fuerza actuando entre los nucleones. Por lo tanto, el *intercambio* de un pión entre dos nucleones conduce a la fuerza nucleónica que actúa entre ellos, de acuerdo con Yukawa. (Una idea similar se encontró anteriormente cuando en la sección 14-1, se discutió el intercambio de un fonón entre dos electrones en un par de Cooper).

Al hacer su proposición, Yukawa fue guiado por dos analogías que había en ese tiempo. Una de ellas es la ligadura covalente en la molécula de H_2 y de otras moléculas orgánicas (como se estudió en la sección 12-3). En este proceso aparece una fuerza, a partir del compartimiento o del intercambio de un electrón entre dos átomos. Una analogía aún más cercana es la fuerza de Coulomb que actúa entre dos partículas cargadas. De acuerdo con la muy exitosa teoría de la electrodinámica cuántica (mencionada en la sección 8-7), alrededor de cada carga se tiene un campo de fotones y la fuerza de Coulomb realmente aparece como resultado de un intercambio de fotones entre los campos.

La electrodinámica cuántica demuestra que el largo alcance de la fuerza de Coulomb es una consecuencia del hecho de que los fotones poseen masa en reposo cero. Yukawa adaptó la teoría al caso de dos nucleones, interactuando con una fuerza nucleónica de corto alcance, suponiendo que la partícula intercambiada posee una masa en reposo diferente de cero. Cuando hizo su proposición, los piones no habían sido detectados, sin embargo, Yukawa fue capaz de estimar la masa en reposo que conduciría al intervalo de observación realizando un cálculo similar al que se presenta en el siguiente ejemplo.

Ejemplo 17-3. Utilizar la conservación de la energía, en su forma modificada por el principio de incertidumbre energía-tiempo, para establecer una relación entre el alcance r' de la fuerza nucleónica y la masa en reposo m_π del mesón π cuyo intercambio produce la fuerza. Utilizar después dicha relación para estimar el valor de m_π, suponiendo $r' = 2$ F.

El alcance de la fuerza nucleónica es del orden del radio r' del campo del mesón π que rodea a un nucleón, ya que los dos nucleones experimentan esa fuerza únicamente cuando sus campos mesónicos se traslapan. Para estimar el radio del campo, considérese un proceso en el que un nucleón emite un mesón con masa en reposo m_π, que viaja hacia los límites del campo regresando después al nucleón donde es absorbida. En este proceso, el mesón viaja a una distancia del orden de r'. Mientras esto sucede ocurre una violación de la conservación de la masa-energía. La razón es que la energía total del sistema es igual a la energía de la masa en reposo de un nucleón antes y después del proceso y una energía de la masa en reposo de un nucleón más, cuando menos, la energía de la masa en reposo de un mesón π durante el proceso.

Sin embargo, el principio de incertidumbre de energía-tiempo demuestra que una violación de la conservación de la energía por una cantidad

$$\Delta E \sim m_\pi c^2$$

no es imposible, sino sucede en un tiempo mayor que Δt, donde

$$\Delta E \, \Delta t \sim \hbar$$

La razón es que dicha violación no se podría detectar dado que la energía no puede medirse en un tiempo Δt con mayor precisión que ΔE. Como la velocidad del pión no puede ser mayor que c, el tiempo que requiere para viajar una distancia del orden de r' es cuando menos

$$\Delta t \sim \frac{r'}{c}$$

Estas tres relaciones dan

$$m_\pi c^2 \sim \frac{\hbar}{\Delta t} \sim \frac{\hbar c}{r'}$$

o bien

$$m_\pi \sim \frac{\hbar}{r'c} \tag{17-6}$$

Si se toma $r' = 2$ F, (17-6) proporciona una estimación de la masa en reposo del mesón π

$$m_\pi \sim \frac{\hbar}{r'c} \sim \frac{1 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{2 \times 10^{-15} \text{ m} \times 3 \times 10^{8} \text{ m/seg}} \sim 2 \times 10^{-28} \text{ kg}$$

Lo anterior también puede ser escrito como

$$m_\pi \sim 200 \, m \sim 100 \text{ MeV}/c^2$$

donde m es la masa en reposo de un electrón la cual tiene el valor $m = 0.511$ MeV/c^2. ◀

Vale la pena reafirmar el argumento utilizado en el ejemplo 17-3. Un mesón con masa en reposo $m_\pi \sim \hbar/r'c$ conduce a una fuerza nucleónica de alcance $\sim r'$ ya que los nucleones no podrían intercambiar el mesón si estuvieran separados una distancia mayor, pues su tiempo de vuelo sería tan grande que el principio de incertidumbre permitiría una determinación suficientemente precisa de la energía total del sistema de modo que la violación de la conservación de la energía sería ahora detectable. Este argumento también explicó cómo es que la fuerza de Coulomb puede tener un largo alcance. Como un fotón posee masa en reposo cero, no existe un límite inferior a la energía total que pueda llevar. Cuando dos partículas cargadas se encuentran separadas una distancia muy grande, pueden intercambiar un fotón de muy baja energía cinética sin violar el principio de incertidumbre de la energía-tiempo. Desde luego que tal fotón llevará un impulso lineal muy pequeño. Por lo tanto, la fuerza que produce es muy débil, en concordancia con la bien conocida disminución en la intensidad de la fuerza de Coulomb a medida que aumenta la separación de las partículas cargadas.

En el tiempo en que Yukawa hizo su proposición no se conocían partículas cuya masa en reposo estuviera entre la del electrón, 0.5 MeV/c^2 y la del protón que es igual a 938 MeV/c^2. Los mesones π^+ que poseen una carga positiva igual en magnitud a la del electrón, y los mesones π^- que poseen una carga negativa de la misma magnitud, fueron detectados por primera vez en 1947 por Powell y sus colaboradores. Se encontró que formaban parte de la radiación cósmica que constantemente bombardea la tierra. Poco tiempo después, los mesones π cargados fueron producidos artificialmente en un ciclotrón grande por medio de colisiones entre nucleones de muy alta energía y nucleones en un blanco. Los mesones de la radiación

cósmica también se producen inicialmente en colisiones de muy alta energía. Las mediciones demuestran que los mesones π^+ y π^- tienen la misma masa en reposo

$$m_{\pi^+} = m_{\pi^-} = 140 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-7}$$

El resultado anterior es suficientemente cercano a la predicción de Yukawa, $m_\pi \sim 100$ MeV/c^2. En 1950, Moyer y sus colaboradores observaron por primera vez mesones π^0 como producto de colisiones de alta energía. Se ha encontrado que su masa en reposo es

$$m_{\pi^0} = 135 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-8}$$

Los mesones π libres que se producen en estos experimentos, son liberados de los campos de los mesones π que rodean a los núcleos en colisión, por la energía que resulta disponible en dicha colisión. Se trata de las mismas partículas que los mesones estudiados en la teoría mesónica de las fuerzas nucleónicas. La única diferencia es que los mesones de Yukawa se encuentran ligados antes de la interacción de los nucleones debido a los requisitos de conservación de la energía. Como es obviamente el caso para los piones ligados que producen la intensa fuerza entre dos nucleones, la interacción de piones libres con nucleones también es muy intensa. Esto fue indicado de varias maneras en los primeros experimentos hechos con piones de rayos cósmicos y de ciclotrón, los cuales demostraron que la sección de interacción de un pión, con una longitud de onda de de Broglie muy corta, con un núcleo, es muy cercana a su valor máximo posible, la sección geométrica proyectada de área $\pi r'^2$, donde la cantidad r' es el radio nuclear. Asimismo, la interacción es particularmente violenta; cuando un pión entra en un núcleo la mayor parte de su energía de masa en reposo se utiliza en partir al núcleo en fragmentos que son despedidos energéticamente en todas direcciones. Desde luego que la detección de piones libres proporciona una verificación sorprendente de la validez de la teoría mesónica.

En la dispersión neutrón-protón se encuentra evidencia experimental del intercambio de piones entre dos nucleones en interacción. Como se discutió en una sección anterior, la simetría aproximada en torno a 90° de la sección diferencial de dispersión, implica que en aproximadamente la mitad de las dispersiones los neutrones se transforman en protones y los protones en neutrones cuando los nucleones interactúan. Una de las formas como esto puede suceder se indica en las reacciones

$$n \rightarrow p + \pi^- \quad \text{entonces} \quad \pi^- + p \rightarrow n$$

Es decir, el neutrón emite un mesón π^- negativamente cargado en su campo, convirtiéndose en un protón. Entonces, el mesón π^- se une al campo del protón y es absorbido por el protón que se convierte en un neutrón. El proceso de dispersión también puede suceder a través de las reacciones

$$p \rightarrow n + \pi^+ \quad \text{entonces} \quad \pi^+ + n \rightarrow p$$

En este caso, el protón emite un mesón π^+ positivamente cargado que es subsecuentemente absorbido por el neutrón. Por lo tanto, en aproximadamente la mitad de las dispersiones neutrón-protón un mesón transfiere carga así como impulso entre los dos nucleones en interacción.

Debido a que la sección diferencial de dispersión neutrón-protón es aproximadamente simétrica respecto a 90º, en aproximadamente la mitad de las dispersiones el neutrón y el protón no intercambian identidades cuando interactúa. Sin embargo, de todos modos deben intercambiar un mesón que lleva el impulso transferido. Los dos conjuntos de reacciones que ocurren son

$$n \rightarrow n + \pi^0 \quad \text{entonces} \quad \pi^0 + p \rightarrow p$$

y

$$p \rightarrow p + \pi^0 \quad \text{entonces} \quad \pi^0 + n \rightarrow n$$

El mesón π^0 transfiere impulso, pero no carga, cuando los nucleones interactúan.

Esta interpretación implica que un protón aislado deberá estar rodeado de un campo mesónico que en algunas ocasiones contendrá a un mesón π^0 y en otras contendrá un mesón π^+ Las reacciones que se llevan a cabo cuando un nucleón emite un mesón son

$$p \rightarrow p + \pi^0 \quad \text{o bien} \quad p \rightarrow n + \pi^+$$

Desde luego que el nucleón deberá absorber el mesón que ha emitido en un tiempo muy corto, pero entonces, podrá emitir otro. El campo mesónico que rodea a un neutrón aislado deberá contener algunas veces un mesón π^0 en otras un mesón π^- los cuales son emitidos por medio de las reacciones

$$n \rightarrow n + \pi^0 \quad \text{o bien} \quad n \rightarrow p + \pi^-$$

Sin embargo, el campo del protón no puede contener un mesón π^- y el campo del neutrón no puede contener un mesón π^+.En mediciones recientes de dispersión de electrones de la distribución de carga del protón y del neutrón, se obtiene una verificación experimental muy directa de estas predicciones. En la figura 17-17 se muestra la dependencia radial de las densidades de carga de las dos especies de nucleones. La densidad de carga del protón es positiva en todas partes y se extiende hasta una distancia r de aproximadamente 2F. Para r mayor, pero dentro de este límite (en el campo) el mesón π^+ es el portador de la carga. La densidad de carga del neutrón *no* es cero en todas partes. Para r pequeña (cerca del centro donde se encontraría p de la disociación $p + \pi^-$) es positiva, y a r mayor (en el campo donde π^- se encontraría) es negativa. La integral de volumen de la densidad de carga, sin embargo, es cero, puesto que el neutrón es neutral y no posee una carga neta.

La teoría mesónica también proporciona una explicación de cómo es que los neutrones pueden tener un momento dipolar magnético intrínseco, a pesar de que su carga neta es cero. En algunas ocasiones se convierte en un protón más un π^-. El protón posee un momento dipolar magnético intrínseco, y el π^- puede producir una corriente que hace un aporte adicional al momento dipolar magnético.

Para valores de r cercanos a 2F, las densidades de carga nucleónicas son proporcionales a alguna medida de la intensidad de sus campos mesónicos. Ambos decrecen de modo bastante gradual a medida que r aumenta. La fuerza nucleónica que actúa entre dos nucleones cuando se traslapan los campos mesónicos, también decrece de modo gradual, a medida que aumenta su separación. Por lo tanto, el principio de la parte de atracción del potencial nucleónico, que describe la fuerza nucleónica que actúa cuando los dos nucleones se aproximan lo suficiente para empezar la interacción, es bastante gradual. No es abrupta como en el potencial nucleónico simplificado de las figuras 17-12 y 17-13. De hecho, en el ejemplo 17-4 se indicará que para valores grandes de la distancia de separación r, el potencial nucleónico deberá seguir el *potencial de Yukawa.*

$$V(r) = -g^2 \frac{e^{-r/r'}}{r} \tag{17-9}$$

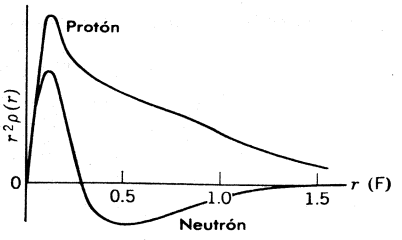


FIGURA 17-17
Dependencia radial de la densidad de carga de un protón y de un neutrón.

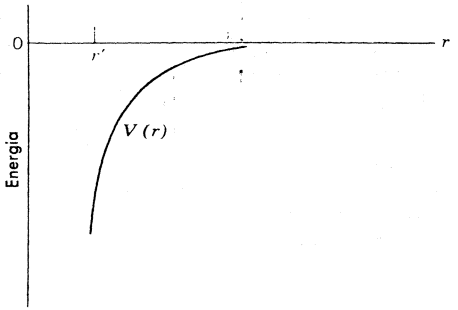


FIGURA 17-18
Potencial de Yukawa. Para r comparable con ó mayor que $r' = \hbar/m_\pi c \simeq 1.5$ F, el potencial nucleónico deberá tener esta forma.

donde

$$r' = \frac{\hbar}{m_\pi c} \simeq 1.5 \text{ F}$$

El alcance r' del potencial está especificado por la teoría para que tenga un valor que concuerde con el argumento sencillo del ejemplo 17-3 y con el experimento. En general, la intensidad del potencial depende de la constante g^2, cuyo valor no es determinado por la teoría por lo que se puede encontrar ajustando el valor de g^2 que mejor concuerde con los resultados experimentales. En términos de la cantidad adimensional $g^2/\hbar c$, el valor así determinado es

$$g^2/\hbar c \simeq 15 \tag{17-10}$$

En la figura 17-18 aparece una gráfica del potencial de Yukawa. Obsérvese que $V(r) \propto e^{-r/r'}/r$ disminuye en magnitud a medida que r aumenta gradualmente, pero la disminución es mucho más rápida que la correspondiente al potencial de Coulomb de largo alcance $V(r) \propto 1/r$.

Para valores de r pequeños comparados con 2F, el potencial nucleónico se desvía notoriamente del potencial de Yukawa. De hecho, se sabe que se vuelve de repulsión a $\sim$0.5 F. Se piensa que la coraza de repulsión del potencial aparece por el intercambio de mesones que se verá más adelante, cuyas masas en reposo son considerablemente mayores que la del mesón π Los detalles acerca del origen de la coraza de repulsión todavía no se entienden bien.

Ejemplo 17-4. Escribir una ecuación relativista para los mesones π y demostrar después cómo se puede obtener el potencial de Yukawa, (17-9), a partir de esa ecuación. Se puede obtener una ecuación de onda relativista para los mesones π escribiendo la ecuación relativista de la energía

$$E^2 = c^2p^2 + m_\pi^2c^4$$

donde

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

sustituyendo la energía total y las componentes del impulso por los operadores asociados de (5-32)

$$E \to i\hbar\, \partial/\partial t \qquad p_x \to -i\hbar\, \partial/\partial x \qquad p_y \to -i\hbar\, \partial/\partial y \qquad p_z \to -i\hbar\, \partial/\partial z$$

y haciendo que la ecuación de operadores así obtenida opere sobre la función Ψ se obtiene el resultado

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -c^2\hbar^2\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + m_\pi^2c^4\Psi$$

o bien

$$\nabla^2\Psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \frac{m_\pi^2c^4}{\hbar^2}\Psi$$

que es la *ecuación de Klein-Gordon,* que tiene un papel importante en la electrodinámica cuántica de bosones. Por ejemplo, para $m_\pi = 0$ se reduce a la ecuación de onda clásica

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}$$

para fotones, que son los cuantos del campo electromagnético.

La ecuación de onda clásica tiene una solución estática de la forma

$$\Psi = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \qquad r > 0$$

que puede verificarse fácilmente por sustitución, utilizando la relación

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Psi}{dr}\right)$$

para $\Psi = \Psi(r)$. Para $m_\pi \neq 0$ la ecuación de Klein-Gordon tiene una solución estática de la forma

$$\Psi = -g^2\frac{e^{-r/r'}}{r} \qquad r > 0$$

donde

$$r' = \frac{\hbar}{m_\pi c}$$

lo que también se puede verificar fácilmente por sustitución. Dado que la solución a la ecuación de onda para cuántos con masa en reposo cero produce el potencial de interacción de Coulomb para el campo electromagnético, la solución correspondiente a cuantos con masa en reposo diferente de cero se supone que es el potencial de interacción para el campo mesónico, es decir, el potencial de Yukawa (17-9).

La constante g^2 determina la intensidad del potencial de Yukawa, del mismo modo que la constante e^2 (el cuadrado de la carga del electrón) determina la intensidad del potencial de Coulomb. Obsérvese que la cantidad adimensional $g^2/\hbar c$ tiene el valor $\simeq 15$, mientras que la cantidad adimensional $e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ (la constante de estructura fina) tiene el valor $\simeq 1/137$. Esta es una indicación de la intensidad de la fuerza nucleónica. ◀

En colisiones de alta energía entre nucleones, se pueden crear piones libres, por si sólos, e.g.

$$p + p \rightarrow \pi^+ + d \qquad (17\text{-}11)$$

donde d es el deuterón, o bien pueden ser destruidos en colisiones entre piones y nucleones, e.g.

$$\pi^+ + d \rightarrow p + p \qquad (17\text{-}12)$$

De lo anterior se puede concluir inmediatamente que los piones no pueden ser fermiones. La razón es que el número de fermiones en un sistema aislado siempre permanece constante, en el sentido de que si se produce un fermión, o se destruye, siempre ocurre simultáneamente con la producción, o destrucción, de un antifermión. Ejemplos de lo anterior son la producción o aniquilación de pares electrónicos. Los piones son bosones, así como los fotones son también bosones, que pueden ser emitidos o absorbidos de modo singular. Como todo bosón, los piones deben tener spin entero; es decir, $s = 0$, o 1, o 2,....Las mediciones demuestran que en los tres casos, π^-, π^0, y π^+, *el spin del pión es 0.* La primera de estas medidas implicó aplicar el principio de balance detallado (ver la discusión de (11-4)) al cociente observado de las secciones de dispersión hacia adelante y retrodispersión, de (17-11) y (17-12). El valor del spin para π^+ influencia la sección para la reacción hacia adelante ya que la velocidad de la reacción es proporcional a la densidad de estados que puede ser poblada y ésta es proporcional al factor de degeneración del spin $(2s + 1)$. El cociente de secciones de dispersión demostró que $s = 0$.

Una propiedad muy importante de los piones es que los *piones poseen paridad intrínseca impar*. La evidencia inicial provino de la reacción

$$\pi^- + d \rightarrow n + n \tag{17-13}$$

El pión negativamente cargado es capturado por el deuterón después de caer por una secuencia de varios estados parecidos a los electrónicos atómicos, hasta el estado $l = 0$, donde su función de onda tiene un traslape grande con el deuterón. Por lo tanto, el impulso angular total a la izquierda de (17-13) es el del estado base del deuterón con spin 1. Por lo tanto, la conservación del impulso angular permite la emisión de dos neutrones cuyo impulso angular orbital total deberá ser $l = 0$ o 2 y spins "paralelos", o con $l = 1$ y spins "antiparalelos". La primera posibilidad debe descartarse puesto que resultaría en una eigenfunción simétrica total para el sistema de dos fermiones. Por lo tanto, los neutrones son emitidos en un estado en el que el impulso angular orbital total es $l = 1$. La paridad de un estado tal es impar, de acuerdo con la regla usual de que la paridad está dada por $(-1)^l$. Así pues, dado que la paridad se conserva en a interacción nuclear, o nucleónica, la paridad del sistema $\pi^- + d$ debe ser impar. Ahora bien, la paridad del estado base del deuterón es par, y la regla $(-1)^l$ dice que la paridad asociada con el movimiento $l = 0$ del π^- capturado es también par, por lo tanto, el mesón π^- deberá tener una paridad intrínseca, que es impar. Lo mismo se aplica a los otros piones. Como el número de nucleones presentes en la reacción no cambia, la paridad intrínseca de un nucleón es indeterminada; sin embargo, convencionalmente se toma como par.

El triplete de piones tienen masas similares, números cuánticos idénticos y participan de igual modo en la interacción nucleónica. Entonces es natural decir que *el pión es una partícula con isospín* $T = 1$, y que tiene manifestaciones $T_z = -1$ llamada π^-, $T_z = 0$ llamada π^0, y $T_z = +1$ llamada π^+. Al hacerlo se está generalizando la relación entre T_z y la carga eléctrica. La forma utilizada originalmente para nucleones, (17-4), es equivalente a la relación

$$Q = T_z + 1/2 \qquad \text{(nucleones)} \tag{17-14a}$$

donde Q es la carga en unidades cuya magnitud es la carga electrónica. Por ejemplo, para el neutrón $T_z = -1/2$ de lo anterior se obtiene $Q = 0$, y para el protón $T_z = +1/2$, $Q = 1$ igual que antes. Para piones la relación es diferente, ya que

$$Q = T_z \qquad \text{(piones)} \tag{17-14b}$$

Sin embargo, estas dos relaciones pueden ser incorporadas en una sóla escribiendo,

$$Q = T_z + B/2 \qquad \text{(nucleones y piones)} \tag{17-15}$$

donde B se denomina el *número bariónico*, que tiene el valor 1 para un nucleón y 0 para un pión.

Los piones son inestables. El π^0 decae espontáneamente por una interacción electromagnética con una vida de aproximadamente 10^{-15} seg. en dos fotones de alta energía,

$$\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma \tag{17-16}$$

o por otro lado, raramente, en un par electrón-positrón y un fotón. A pesar de que ésto parece como un tiempo de decaimiento muy corto, deberá compararse con el tiempo 10^{-23} seg. que caracterizaría a dicho decaimiento si se realizara bajo la intensa interacción nucleónica (o nuclear). El valor 10^{-23} seg. es justamente el tiempo en que partículas moviéndose con velocidad relativa $c \sim 10^8$ m/seg. se traslaparían en una distancia dentro del alcance de las fuerzas nucleónicas $r' \sim 10^{-15}$m. El primer hecho utilizado en la identificación de la naturaleza electromagnética del decaimiento del π^0 es que los fotones participan únicamente en interacciones electromagnéticas y que el tiempo de decaimiento es mucho mayor que 10^{-23} seg. que sería suficiente si pudiera realizarse por medio de la interacción más fuerte.

Los otros piones no decaen en igual forma que el pión neutral. En su lugar, el π^+ decae con un tiempo de vida aún mayor de 10^{-8} seg., de acuerdo con el esquema

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \tag{17-17}$$

donde μ^+ representa el *muón* positivamente cargado, y ν_μ es el *neutrino muónico*. El π^- decae con el mismo tiempo de vida de acuerdo con el esquema

$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu \tag{17-18}$$

donde μ^- es el muón negativamente cargado y $\bar{\nu}_\mu$ es el antineutrino muónico. El muón positivo es la antipartícula del muón negativo, del mismo modo que el positrón es la antipartícula del electrón. De hecho, los electrones son como los muones esencialmente en todos aspectos, excepto que la masa de los muones es mayor. El decaimiento del pión cargado implica una interacción que es uno de dos casos relacionados. Como podría adivinarse de la terminología usada, el otro caso es la interacción del decaimiento β de la física nuclear. El hecho de que el tiempo de vida para el decaimiento del pión cargado es mucho mayor que para el decaimiento electromagnético del pión neutral, es una reflexión del hecho de que la interacción implicada en el decaimiento es mucho más débil que la interacción electromagnética. El estudiante recordará que se hizo una comparación similar en el caso del decaimiento β. Por estas razones, tanto el decaimiento de un neutrón en un protón más un electrón y (lo que ahora se llama) un antineutrino electrónico, como el decaimiento de un pión positivo o negativo en un muón positivo o negativo y un neutrino o antineutrino muónico, se dice se llevan a cabo vía *la interacción débil*. Esta terminología conduce a que la interacción nucleónica se llame la *interacción fuerte*. En particular, en la física de partículas, los términos interacción fuerte e interacción débil son utilizados para identificar lo que en física nuclear usualmente se llama interacción nucleónica (o nuclear) y la interacción del decaimiento β

17-5 Muones

Los muones no forman parte de la teoría de Yukawa sobre el origen de la interacción fuerte, aunque ésta apreciación no fue hecha sino hasta algún tiempo después de su descubrimiento en 1936 por Anderson y Neddermeyer. Estos investigadores encontraron dichas partículas como componentes de la radiación cósmica, y demostraron que su masa en reposo es intermedia entre la masa en reposo de un electrón y la correspondiente de un protón. Ahora se sabe que son el producto del decaimiento de piones en la radiación cósmica. Sin embargo, en 1936, los piones no se habían descubierto y naturalmente se supuso que el μ^+ y el μ^- eran los mesones de Yukawa (de hecho, originalmente se llamaron mesones μ). Sin embargo, la acumulación siempre creciente de evidencias demostró que la interacción de muones con materia es muy débil. Por ejemplo, los muones en la radiación cósmica pueden penetrar grandes espesores de materia sólida con muy poca atenuación, ya que se pueden detectar en minas profundas. Siendo este el caso, los muones no podrían ser las partículas responsables de la interacción fuerte, a pesar del hecho de que su masa en reposo

$$m_{\mu+} = m_{\mu-} = 106 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-19}$$

es bastante cercana al valor predicho por Yukawa.

Esta situación fue la fuente de considerable confusión en los diez años anteriores al descubrimiento de los piones, sin embargo, después de su descubrimiento inmediatamente se supuso que los piones eran los mesones de Yukawa ya que las primeras evidencias indicaron que su interacción con la materia es fuerte. Por lo tanto, los piones están estrechamente asociados con los nucleones e interactúan por medio de la interacción fuerte. Los muones se encuentran estrechamente asociados con los electrones e interactúan por medio de la interacción débil.

El muón y el electrón, los neutrinos muónico y electrónico, y las antipartículas de cada uno de ellos son denominados colectivamente *leptones.* Una de las evidencias para la asociación entre el muón negativo y el electrón es que ambos son *fermiones,* ambos tienen *carga -e,* y *spin* 1/2, y ambos poseen momentos dipolares magnéticos correspondientes a un *factor de spin* $g = 2$. Sus antipartículas, el muón positivo y el positrón, tienen cargas en momentos dipolares magnéticos con el signo inverso. Los neutrinos muónico y electrónico son también *fermiones de spin 1/2,* sin embargo, no tienen carga y no tienen momentos dipolares eléctricos. Se distinguen físicamente de sus antipartículas por sus *helicidades,* (ver la sección 16-4) las cuales son *izquierdas para neutrinos y derechas para antineutrinos.* Para estas partículas que participan en la interacción débil, no es apropiado definir una paridad intrínseca o un isospín. La razón es que la paridad no se conserva en dicha interacción, como se vio en la sección 16-4, y el isospín tampoco se conserva en la interacción débil, como se verá en una sección subsiguiente.

Los muones decaen espontáneamente, por medio de la interacción débil, de acuerdo con los siguientes esquemas

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu \qquad (17\text{-}20)$$

$$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu \qquad (17\text{-}21)$$

donde se ha utilizado e^+ para el positrón y e^- para el electrón. La vida media para ambos decaimientos es igual y tiene un valor de aproximadamente 10^{-6} seg. La necesidad de distinguir entre el neutrino electrónico ν_e y el neutrino muónico ν_μ fue demostrada experimentalmente en 1962, demostrando que los neutrinos muónicos obtenidos a partir del decaimiento de piones, (17-17) y (17-18), no inducen decaimiento β electrónico.

Como los leptones son fermiones, son creados y destruídos en pares partícula-antipartícula. Consecuentemente, el número presente en un sistema aislado se mantendrá constante, si cada partícula hace una contribución positiva a la cuenta y cada antipartícula hace una contribución negativa. Debido a la distinción entre leptones electrónicos y muónicos, cada tipo por separado satisface una *ley de conservación del número leptónico.* Esto se puede escribir

$$\sum L_e = \text{const} \qquad (17\text{-}22)$$

$$\sum L_\mu = \text{const} \qquad (17\text{-}23)$$

El *número leptónico electrónico* L_e *es* + 1 para un electrón y - 1 para un positrón; es + 1 para un neutrino electrónico y -1 para un antineutrino electrónico. El número leptónico muónico L_μ es + 1 para un muón negativo y - 1 para un muón positivo; es + 1 para un neutrino muónico y - 1 para un antineutrino muónico. El estudiante podrá notar que en todos los casos el número leptónico es + *1 para una partícula y - 1 para su antipartícula.* También podrá notar que los esquemas de decaimiento muónico (17-20) y (17-21) satisfacen ambas leyes de conservación, como también lo hacen los decaimientos β electrónicos discutidos en el capítulo 16. Más adelante se considerará una ley de conservación similar para el número bariónico B, que es + 1 para un nucleón y - 1 para un antinucleón.

A pesar de que es mucho lo que se conoce respecto de la interacción débil y de las partículas que participan en ella, aún quedan algunas preguntas sin respuesta que son fundamentales. Por ejemplo, ¿por qué la naturaleza requiere tanto del electrón (más el neutrino asociado y la antipartícula de cada uno) como *también* del muón (más el neutrino asociado y sus antipartículas)?. Excepto por la diferencia en masa en reposo, el electrón y el muón son tan similares que cada uno parece hacer al otro redundante.

Otra pregunta sin respuesta se relaciona con la cuantización del campo de la interacción débil. La interacción débil resulta de intercambios, entre dos partículas participantes, de su cuanto del campo (el pión, cuyas propiedades se conocen bien, y probablemente otros mesones que se estudiarán más adelante, cuyas propiedades se conocen razonablemente bien). La interacción electromagnética implica intercambios de su cuanto del campo (el fotón, cuyas propiedades son ciertamente bien conocidas). Aún la interacción gravitacional implica intercambios de su cuanto del campo (el gravitón, cuyas propiedades más importantes también se conocen, como se mencionará más adelante). Por lo tanto, es de esperarse

que la interacción débil sea realizada por el cuanto de su campo. El cuanto tiene un nombre; se le llama *bosón intermedio*. Sin embargo, aparte del hecho de que debe ser un bosón (como es el caso para todos los cuantos del campo), y que probablemente tiene spin 1, es muy poco lo que se sabe acerca de él. El bosón intermedio aún no ha sido detectado, a pesar de que la búsqueda experimental ha sido capaz de demostrar que la masa en reposo del bosón intermedio debe ser mayor que aproximadamente diez masas nucleónicas. Sin embargo, este límite inferior, verifica que la interacción débil es de extremadamente corto alcance. El punto es que la relación inversa entre la masa en reposo del cuanto del campo y el alcance de la interacción asociada, que se ilustra en (17-6), debe aplicarse a las cuatro interacciones fundamentales de la naturaleza.

17.6 Extrañeza

No mucho tiempo después del descubrimiento de los piones en los rayos cósmicos, dicha fuente empezó a proporcionar evidencia sobre la existencia de una nueva familia de mesones que tenía aproximadamente tres veces la masa en reposo del pión, hoy denominados *mesones K*, y también indicaba que existe una partícula cuya masa en reposo era aproximadamente 1.2 veces la masa en reposo del nucleón y que hoy se llama *partícula* Λ^0 Experimentos más recientes demuestran que la masa en reposo de Λ^0 es

$$m_{\Lambda^0} = 1116 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-24}$$

que puede compararse con las masas en reposo del neutrón y del protón que son 940 y 938 MeV/c^2. Como el neutrón, *la partícula* Λ^0 *es un fermión neutral, con spin 1/2 y con paridad intrínseca par*. Dado que no existe otra partícula con masa en reposo similar, la Λ^0 es considerada como el único miembro de un singulete de isospín; i.e., la Λ^0 tiene $T = \mathbf{0}$ y $T_z = 0$.

Experimentos que utilizan aceleradores de alta energía, han demostrado que existen cuatro mesones K, los cargados positiva y negativamente, K^+ y K^-, y los neutrales K^0 y $\overline{K^0}$. Como los mesones π *los mesones K son todos bosones de spin 0 y paridad intrínseca impar.* Sus masas en reposo son

$$m_{K^+} = m_{K^-} = 494 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-25}$$

y

$$m_{K^0} = m_{\overline{K^0}} = 498 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-26}$$

La Λ^0 es producida en asociación con un K, con una sección de producción muy grande indicativa de una interacción fuerte. Un ejemplo es la reacción

$$\pi^- + p \rightarrow \Lambda^0 + K^0 \tag{17-27}$$

Se utilizará la suposición, como en física nuclear, de que el isospín se conserva en la interacción fuerte lo que ocasiona que en la reacción se asignen números cuánticos de isospín a los mesones K. Como $T = 1$ para π^-, $T = 1/2$ para el protón p, y $T = 0$ para Λ^0, las únicas posibilidades para K^0 son $T = 1/2$ o $T = 3/2$. Si esto último fuera cierto, existiría un cuarteto de valores de T_z y la familia de mesones K cubriría un intervalo de cuatro estados de carga eléctrica diferentes. Sin embargo, de hecho, sólo existen tres estados de carga: $Q = -1, 0, +1$. Por lo tanto, *para el mesón* K^0, *y los otros mesones K*, $T = 1/2$. Obsérvese también que como T_z tiene los valores -1 para π^-, + 1/2 para p, y O para Λ^0, debe tener el valor $T_z = -1/2$ para K^0. *Considerando la forma como* Q depende de T_z en otras situaciones, naturalmente se dice que el mesón K con $T = 1/2$, $T_z = +1/2$ es el K^+. El K^- es la antipartícula del K^+, y $\overline{K^0}$ es la antipartícula de K^0. Ambas antipartículas tienen también $T = 1/2$. La asignación de T_z depende del hecho de que T_z *para una antipartícula debe ser opuesta a* T_z *para la partícula correspondiente*. Esto puede verse fácilmente considerando la reacción de producción del par protón-antiprotón, que se realiza por medio de la reacción fuerte

$$p + p \rightarrow p + p + p + \bar{p} \tag{17-28}$$

Por lo tanto, $T_z = -1/2$ para el K^- y $T_z = +1/2$ para el $\overline{K^0}$.

La reacción (17-28) también es un buen ejemplo de la *ley de conservación del número bariónico*

$$\sum B = \text{const} \tag{17-29}$$

donde el número bariónico B tiene el valor $+1$ para un nucleón y -1 para un antinucleón. Dado que los nucleones son fermiones, su número total en un sistema aislado se da, bajo toda circunstancia, constante si se cuenta en la forma antes indicada. La ley de conservación también se aplica a situaciones en las que el sistema contenga partículas que no sean nucleones, que pronto se introducirán, que también se llaman bariones.

Los mesones K decaen por medio de la interacción débil, con diferentes modos de decaimiento, en piones, y en otros modos, en leptones. El tiempo de vida del K^+ y del K^- es aproximadamente 10^{-8} seg. El K^0 y el $\overline{K^0}$ poseen una rara distribución de tiempos de decaimiento que se compone de una mezcla, en iguales proporciones, de un exponencial con un tiempo de vida de aproximadamente 10^{-10} seg. y un exponencial de tiempo de vida más larga de aproximadamente 10^{-8} seg. La presencia de dos tiempos de vidas tiene un origen muy interesante. Aparece, básicamente, por las interferencias entre las eigenfunciones degeneradas que describen dos partículas de igual masa, K^0 y $\overline{K^0}$, que participan de igual modo en el decaimiento de la interacción débil y que sin embargo, son partículas claramente diferentes. Más adelante en esta sección se tratará de aclarar un poco más este fenómeno y se discutirá una conclusión muy sorprendente que deriva de él, en la siguiente sección.

Todos los mesones K poseen el siguiente modo de decaimiento

$$K \rightarrow \pi + \pi \tag{17-30a}$$

La conservación del impulso angular demuestra inmediatamente que, como ambos mesones K y π tienen spin cero, los dos π's deberán ser emitidos en un estado de impulso angular cero. Este es el modo de decaimiento más frecuente para el K^0 y el $\overline{K^0}$, y el segundo más frecuente para el K^+ y el K^-. Un modo de decaimiento menos frecuente es

$$K \rightarrow \pi + \pi + \pi \tag{17-30b}$$

Como los piones se llevan la mayor parte de la energía disponible en sus masas en reposo, se emiten con impulsos lineales pequeños y, dado que son emitidos de una región de pequeñas dimensiones, salen todos en un estado de impulso angular orbital cero.

El tiempo de vida relativamente largo de los decaimientos definitivamente indican que los decaimientos de K implican la interacción débil. Lo anterior se hace más evidente considerando el balance de paridades en los dos modos de decaimiento especificados en (17-30a) y (17-30b). Como ambos conducen a estados de impulso angular orbital cero, que tienen paridad par, las únicas paridades que se pueden considerar son las intrínsecas de las partículas. Como se argumentó en relación con una reacción que implicaba la interacción fuerte, (17-13), el mesón π posee paridad intrínseca impar. Argumentos similares demuestran que el mesón K también tiene paridad intrínseca impar. Dado que la paridad de la eigenfunción de un sistema es el producto de las paridades de sus componentes, inmediatamente se puede ver que la paridad se conserva en el modo de decaimiento de tres piones de (17-30b), pero no se conserva en el modo de decaimiento de dos piones de (17-30a). Por lo tanto, la conservación de la paridad se puede violar en el decaimiento de K del mismo modo como se puede violar en el decaimiento β, ya que ambos tipos de decaimiento implican la interacción débil que no conserva la paridad.

La Λ^0 es una partícula inestable, con un tiempo de vida de aproximadamente 10^{-10} seg. Sus principales modos de decaimiento son

$$\Lambda^0 \rightarrow p + \pi^- \tag{17-31}$$

y

$$\Lambda^0 \rightarrow n + \pi^0 \tag{17-32}$$

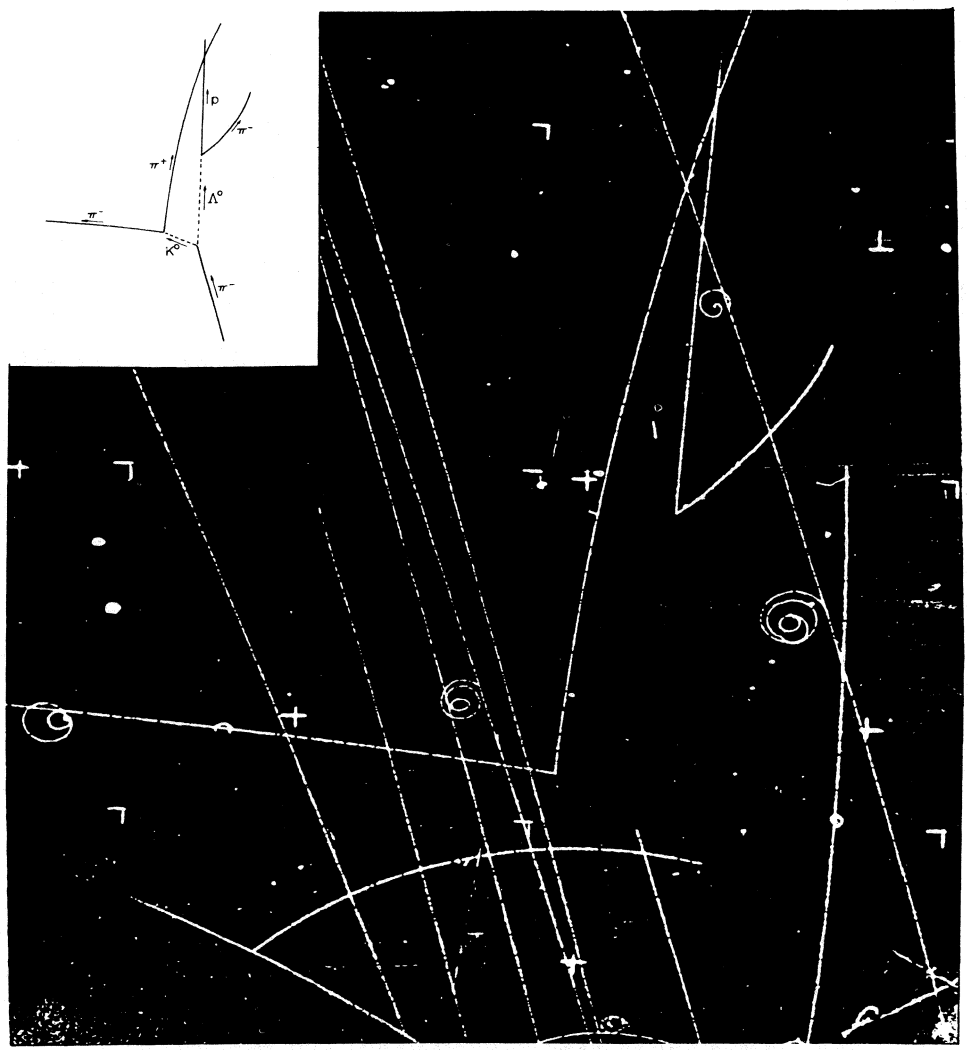


FIGURA 17-19
Producción asociada de una Λ^0 y una K^0 en una cámara de burbujas de hidrógeno. Un π^- incidente interactúa con un p del hidrógeno líquido que llena la cámara. El K^0 decae en un π^+ y un π^-. La Λ^0 decae en un p y un π^-. La producción se realiza por medio de la interacción fuerte, pero los decaimientos en sí utilizan la interacción débil. La curvatura de cada partícula en el campo magnético aplicado se utiliza para identificar a la partícula. (Cortesía del Lawrence Radiation Laboratory).

Estos decaimientos tienen lugar en la interacción débil y violan la conservación de la paridad. Así mismo, la componente z de isospín no se conserva. En ambos decaimientos, $T_z = 0$ antes, mientras que $T_z = -1/2$ después, ya que T_z es $+1/2$ para p, $-1/2$ para n, -1 para π^-, y) para π^0. El isospín mismo no se conserva en estos decaimientos de interacción débil, ya sea porque T $= 0$ antes, mientras que después sólo puede ser $T = 1/2$ o $T = 3/2$, ya que $T = 1/2$ para el nucleón y $T = 1$ para el pión. Considerando detalladamente las velocidades de decaimiento se demuestra que en ambos decaimientos, el sistema pión-nucleón se forma en el estado $T = 1/2$. Análisis similares de otros decaimientos de interacción débil que implican partículas con valores definidos de T y T_z (i.e., partículas que no son leptonas), verifican que en la *interacción débil* $\Delta T = 1/2$ *y* $\Delta T_z = 1/2$.

Recapitulando, las partículas Λ^0 y K se producen, de modo asociado y en grandes proporciones (con una sección relativamente grande) en procesos que implican la interacción fuerte. Ambas decaen independientemente, ya que salen separadas, en procesos que implican la interacción débil. Los decaimientos ocurren con una velocidad baja (con un tiempo de vida relativamente larga) ya que la interacción es débil. La figura 17-19 es una fotografía de trazas en una cámara de burbujas de hidrógeno donde se muestra la producción asociada, (17-27), de una Λ^0 y una K^0 cuando un π^- choca con un p en el hidrógeno que llena la cámara. Después de separarse, la Λ^0 decae en un p y un π^- como en (17-31), y el K^0 decae en un π^+ y un π^- como en (17-30a).

Como la Λ^0 y la K se producen en una interacción fuerte, ¿por qué no es posible que decaiga de modo más favorable, i.e., a una mayor velocidad, por medio de un proceso que implique la interacción fuerte?. Esta significativa pregunta fue contestada por Gell-Mann, e independientemente por Nishijima, en 1953 introduciendo un nuevo número cuántico denominado *extrañeza* S. La extrañeza de una partícula con un multiplete de isospín particular, especifica la desviación de la carga promedio Q del multiplete con respecto a la carga promedio del multiplete piónico si las partículas son mesones, o con respecto a la carga promedio del multiplete nucleónico si son bariones. El término *barión* se refiere a una partícula cuya masa en reposo es igual o mayor que la de un nucleón, la cual participa en la interacción fuerte. Incluye al nucleón, la partícula Λ^0 así como a las partículas de mayor masa Σ, Ξ, y Ω, que serán brevemente descritas más adelante.

Recordando (17-15) el concepto de extrañeza se puede expresar de un modo ligeramente diferente

$$Q = T_z + B/2 \qquad \text{(para piones y nucleones)}$$

que es la relación entre la carga en unidades de carga electrónica Q, la componente z del isospín T_z, y el número bariónico B. Para las partículas Λ^0 y K, las relaciones comparables son

$$Q = T_z + B/2 - 1/2 \qquad \text{(Para } \Lambda^0\text{)} \quad (17\text{-}33)$$

$$Q = T_z + B/2 + 1/2 \qquad \text{(para } K^+ \text{ y } K^0\text{)} \quad (17\text{-}34)$$

$$Q = T_z + B/2 - 1/2 \qquad \text{(para } K^- \text{ y } \overline{K^0}\text{)} \quad (17\text{-}35)$$

El número bariónico B, al introducirse previamente, se definió como 0 para un pión, $+1$ para un nucleón, y -1 para un antinucleón. Aquí se extenderá dicha definición para incluir a todos los bariones y mesones, de modo que $B = +1$ *para un barión,* $B = -1$ *para un antibarión y* $B = 0$ *para un mesón.* Como $B = 0$ tanto en (17-34) como en (17-35), estas ecuaciones afirman, en concordancia con consideraciones anteriores, que $Q = +1$ para la K^+ que tiene $T_z = +1/2$; $Q = 0$ para la K^0 que tiene $T_z = -1/2$; $Q = -1$ para la K^- que tiene $T_z = -1/2$; y $Q = 0$ para la $\overline{K^0}$ que tiene $T_z = +1/2$. Para la Λ^0, $B = +1$ y $T_z = 0$, así que (17-33) correctamente dice que $Q = 0$. En términos del número cuántico S, las cuatro ecuaciones para Q pueden escribirse como

$$Q = T_z + \frac{B + S}{2} \qquad (17\text{-}36)$$

donde $S = 0$ para el nucleón y el pion, $S = -1$ para la Λ^0, $S = +1$ para la K^+ y K^0, y *donde el valor de S para una antipartícula es el negativo de su valor para la partícula,* igual que en el caso de la B. La última afirmación implica que $S = -1$ para K^- y $\overline{K^0}$.

Gell-Mann y Nishijima postularon que, además de que el isospín T se conserve, *en una interacción fuerte* la extrañeza S se conserva. Entonces, la producción asociada de un Λ^0 y un K, como en el ejemplo

$$\pi^- + p \rightarrow \Lambda^0 + K^0$$

debe llevarse a cabo por medio de la interacción fuerte, ya que la S total es cero tanto antes como después de la reacción. Sin embargo, todos los decaimientos de Λ^0 y K se prohiben realizar por medio de la interacción fuerte ya que en todos los casos existe una sola partícula con extrañeza $+1$ que tiene apenas la energía relativista total suficiente para permitir el decaimiento en partículas de extrañeza cero. Examinando los decaimientos de la interacción débil de Λ^0 y K de (17-30) hasta (17-32) se verifica que en cada una de las interacciones (que involucran partículas que no son leptonas) la extrañeza se conserva y de hecho, que en la interacción débil $\Delta S = 1$.

Este es un lugar apropiado para mencionar, una vez más, el fenómeno de interferencia observado en el decaimiento de interacción débil de K^0 y $\overline{K^0}$. Como se afirmó antes, aparece debido a que estas partículas aunque son diferentes, actúan del mismo modo exactamente, en lo que respecta a la interacción débil. Ahora ya se sabe por qué. La K^0 y la $\overline{K^0}$ difieren únicamente en los valores de sus números cuánticos S y T_z, sin embargo, dichos números no importan ya que ninguno de los dos se conservan en la interacción débil.

La consideración de la extrañeza hace posible entender la producción y el decaimiento de los bariones más masivos que se han descubierto en los años recientes. Existen tres conjuntos de estas partículas.. Las *partículas* Σ forman un triplete de isospín Σ^-, Σ^0, Σ^+, con $T = 1$ y T_z 1, 0, + 1, respectivamente. Fueron inicialmente reconocidas como un triplete ya que poseen aproximadamente las mismas masas en reposo

$$m_\Sigma \simeq 1190 \text{ MeV}/c^2. \tag{17-37}$$

Como los otros bariones ya discutidos, las partículas Σ son fermiones de spin 1/2 y paridad intrínseca par. Su extrañeza es $S = -1$. Las *partículas* Ξ constituyen un doblete de isospín con masas casi iguales que tienen el valor

$$m_\Xi \simeq 1320 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-38}$$

Su isospín es $T = 1/2$, con $T_z = -1/2$ para la Ξ^- y $T_z = +1/2$ para la Ξ^0. Una vez más, son fermiones con spin 1/2 y paridad intrínseca par. Sin embargo, su extrañeza es $S = -2$. Finalmente, existe una *partícula* Ω^- cuya masa en reposo es

$$m_\Omega \simeq 1670 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-39}$$

Es un singulete de isospín: $T = 0$, $T_z = 0$. La Ω^- es también un fermión con paridad intrínseca par pero su spin es 3/2. Su extrañeza es $S = -3$.

Cada una de las partículas Σ, Ξ, y Ω son producidas en una colisión de alta energía por medio de la interacción fuerte y asociadas con otras partículas de modo tal que se conserva la extrañeza. Por ejemplo, la Ξ^- con $S = -2$ fue descubierta en rayos cósmicos, siendo producida en asociación con dos mesones K^0 que tienen ambos $S = +1$. Cada uno de ellos decae por medio de la interacción débil, salvo una excepción. Como ejemplo, en el decaimiento de Ξ^-

$$\Xi^- \rightarrow \Lambda^0 + \pi^- \tag{17-40}$$

el tiempo de vida tiene un valor de aproximadamente 10^{-10} seg., que es típica de la interacción débil.

La excepción es la Σ^0, que decae, por medio de la interacción electromagnética, de acuerdo con el esquema.

$$\Sigma^0 \rightarrow \Lambda^0 + \gamma \tag{17-41}$$

Experimentalmente se sabe que su tiempo de vida es menor que 10^{-14} seg., y teóricamente se predice alrededor de 10^{-18} seg. Obsérvese que en este decaimiento de interacción electromagnética, la componente z del isospín se conserva, si se asigna $T_z = 0$ al fotón γ, ya que $T_z = 0$ para la Σ^0 y la Λ^0. Generalmente se observa que T_z *se conserva en la interacción electromagnética.* El decaimiento de Ξ^- (17-40), no puede proceder relativamente rápido por medio de la interacción electromagnética ya que $T_z = -1/2$ para la Ξ^-, $T_z = 0$ para la Λ^0, y $T_z = 0$ para la γ. Por lo tanto, el decaimiento debe proceder mucho más lentamente por medio de la interacción débil.

Considerando (17-36)

$$Q = T_z + \frac{B + S}{2}$$

resulta inmediatamente evidente que la conservación de T_z en la interacción electromagnética implica que *S se conserva en la interacción electromagnética.* El argumento es simplemente que como Q y B se conservan bajo toda circunstancia, si T_z se conserva, entonces, S también deberá hacerlo. Sin embargo, *T no se conserva en la interacción electromagnética.* Esto puede verse si se recuerda que la interacción fuerte conserva el isospín y es independiente de la carga. La interacción electromagnética, definitivamente, no es independiente de la carga, y por lo tanto, no puede conservar el isospín.

Debe mencionarse también, que en 1961 Gell-Mann utilizó conceptos estrechamente relacionados con la extrañeza, que se considerarán más adelante, para predecir la existencia del *mesón* η^0 y el *mesón* η' que subsecuentemente fueron los observados experimentalmente. Estos mesones naturales poseen masas en reposo intermedias entre la del mesón K y la de un nucleón

$$m_{\eta^0} \simeq 550 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-42}$$

y

$$m_{\eta'} \simeq 960 \text{ MeV}/c^2 \tag{17-43}$$

Como los otros mesones, ambos son bosones con spin 0 y paridad intrínseca impar. Asimismo, ambos tienen $S = 0$. Cada uno es un singulete de isospín con $T = 0$ y $T_z = 0$. El η^0 decae electromagnéticamente en aproximadamente 10^{-19} seg., predominantemente en dos fotones. El η' también decae por la interacción electromagnética, pero el valor de su tiempo de vida no se conoce. Su modo de decaimiento predominante produce un η^0 y dos piones.

17.7 Interacciones Fundamentales y Leyes de Conservación

La tabla 17-1 resume parte de la información que se obtuvo en la sección precedente, y en secciones anteriores de este libro, en relación con las cuatro interacciones fundamentales de la naturaleza: *fuerte, electromagnética, débil, y gravitacional.* La comparación de la intensidad intrínseca depende, hasta cierto punto de la forma como se escoja que atributo de la intensidad se va a comparar; los números que se citan se obtuvieron de comparaciones hechas en la manera de la sección 16-4. Todas las partes de la tabla se han discutido previamente, excepto por las características del cuanto del campo gravitacional.

El cuanto del campo gravitacional se denomina *gravitón.* Su masa en reposo debe ser cero ya que la interacción gravitacional tiene el mismo largo alcance que la interacción electromagnética, cuyo cuanto es el fotón de masa en reposo cero. Se sabe, que el spin del gravitón es 2. La razón es que no existe una masa gravitacional negativa, lo que impide la existencia de un dipolo gravitacional oscilante que sería necesario para radiar un gravitón con spin 1. La fuente gravitacional multipolar oscilante más baja, es el cuadrupolo (distribución de masa que oscila entre una forma elipsoidal prolata y una oblata), y una fuente cuadrupolar emite un cuanto de spin 2. Este es esencialmente, el mismo argumento que el utilizado en la sección 16-5 para

TABLA 17-1. Las interacciones fundamentales.

Nombre	Intensidad intrínseca	Cuanto del campo: Nombre	Masa en reposo	Spin	Alcance	Signo
Fuerte (nuclear)	1	Pion	$\sim 10^2$ MeV/c^2 (Con mesones más pesados para la coraza de repulsión)	0	$\sim 10^{-15}$ m (Con pequeña coraza de repulsión)	Atractivo total (de extremo a extremo) (pero con coraza de repulsión)
Electro-magnética	10^{-2}	Fotón		0	Largo ($\propto 1/r$)	Atractivo o repulsivo
Débil (decaimiento β)	10^{-12}	Bosón inter-medio	$> 10^4$ MeV/c^2	1?	$< 10^{-17}$ m?	No se aplica
Gravitacional	10^{-40}	Gravitón	0	2	Largo ($\propto 1/r$)	Siempre de atracción

concluir que un fotón tiene spin 1 puesto que no existen monopolos electromagnéticos oscilantes. La pregunta de si los gravitones (emitidos cuando una estrella al morir se colapsa en un "agujero negro") han sido o no detectados experimentalmente, al momento de escribir esto, es controversial. Sin embargo, ciertamente no existe controversia respecto al hecho de que la interacción gravitacional es la única, de las cuatro, que es a la vez de largo alcance y siempre del mismo signo. Por lo tanto, sus efectos son acumulativos de modo que, a pesar de su debilidad intrínseca, la gravedad es por mucho la más obvia de las interacciones en el mundo macroscópico.

La tabla 17-2 enlista las tres interacciones del mundo microscópico, i.e., de la física cuántica y de todas las cantidades que se conservan en ciertas interacciones. El símbolo +, o —, indica si una cantidad se conserva o nó. Ya se han discutido todas las componentes de esta tabla, excepto las que se refieren a la conjugación de carga y a reversibilidad del tiempo.

Conjugación de carga es el proceso por medio del cual cada partícula de un sistema se cambia por su antipartícula. Como un ejemplo, el conjugado de carga del estado base del átomo de

TABLA 17-2. Aplicabilidad de las leyes fundamentales de conservación a las interacciones fundamentales (+ quiere decir se conserva; — quiere decir no se conserva).

Cantidad conservada	Fuerte	Electro-magnética	Débil	
Energía	+	+	+	
Impulso lineal	+	+	+	
Impulso angular	+	+	+	
Carga	+	+	+	
Número leptómico electrónico	+	+	+	
Número leptónico muónico	+	+	+	
Número bariónico	+	+	+	
Magnitud del isospin	+	—	—	($\Delta T = 1/2$ Para no-leptónicos)
Componentes z del isospin	+	+	—	($\Delta T_z = 1/2$ Para no-leptónicos)
Extrañeza	+	+	—	($\Delta S = 1$ Para no-leptónicos)
Paridad	+	+	—	(Excepto por la violación poco frecuente en el decaimiento lento del sistema K^0, $\overline{K^0}$).
Conjugación de carga	+	+	—	
Reversibiidad del tiempo	+	+	+	

deuterio contiene un núcleo con un antineutrón y un antiprotón así como un positrón atómico. Todas las evidencias experimentales disponibles son consistentes con la conclusión de que la operación tanto de la interacción fuerte como de la electromagnética, no se afectan, o son invariantes a la conjugación de carga. Por ejemplo, dicha invariancia se encuentra en el estudio de la aniquilación, por interacción fuerte, de un protón y un antiprotón en el par, partícula antipartícula, K^+, K^-, más otras partículas, y también se encuentra en medidas del decaimiento electromagnético del mesón η^0 Por lo tanto, se cree que el núcleo del átomo de antideuterio (cuyo comportamiento está regido por la interacción fuerte) así como el positrón (cuyo comportamiento está regido por la interacción electromagnética) actuaría del mismo modo que un núcleo y un electrón en el átomo de deuterio normal, ya que se encuentra en el mismo estado cuántico, a la misma energía. Así pues, se puede decir que la conjugación de carga se conserva en las interacciones fuerte y electromagnética, como se indica en la tabla por los símbolos +, ya que la descripción de un sistema regido por cualquiera de estas interacciones es invariante ante tal operación. Esto es paralelo a la terminología que se usa cuando se dice por medio del símbolo — en la tabla y en cualquier otro lado, que la paridad no se conserva en la interacción débil ya que la descripción de un sistema al que rija no es invariante ante la operación de paridad.

De hecho, la evidencia experimental para el símbolo — en la tabla que indica la conjugación de carga no se conserva en la interacción débil, i.e., que la interacción débil sí distingue entre un sistema y otro de carga conjugada, es la misma que la evidencia experimental para la no-conservación de la paridad en esa interacción. Si el estudiante se refiere al experimento esquemático del decaimiento β y la paridad del $^{27}Co^{60}$ de la figura 16-15, y se imagina que realiza una conjugación de carga sobre la situación normal, inmediatamente podrá ver que la descripción del decaimiento β del anti- $^{27}Co^{60}$ difiere de la descripción del decaimiento β $^{27}Co^{60}$. Dado que el signo de la carga en la corriente de la espira se invierte por la conjugación de la carga, el efecto de esta operación es invertir el sentido de la circulación de la carga positiva en la espira. Sin embargo, la operación no afecta la dirección preferencial de la partícula emitida en el decaimiento. Por lo tanto, se puede ver que, mientras para $^{27}Co^{60}$ la relación entre la circulación de la corriente en la espira, que representa su momento dipolar magnético, y la dirección preferencial de la partícula de masa electrónica emitida en su decaimiento, es una espiral izquierda, para anti- $^{27}Co^{60}$ es una espiral derecha la que describiría la relación entre estas cantidades. Por lo tanto, el experimento del decaimiento β demuestra que en la columna correspondiente a la interacción débil de la tabla 17-2 deben aparecer los símbolos - en lo que toca a paridad y conjugación de carga.

Obsérvese que si la operación de conjugación de carga se realiza primero en el experimento de decaimiento β, visto en su forma normal, en la figura 16-15, y después la operación se realiza sobre la imagen especular (la cual, la figura 16-16 demuestra que está relacionada con la operación de paridad) del sistema con carga conjugada, los efectos de ambas operaciones se nulifican entre sí. La razón es que el sentido de la circulación de la corriente en la espira se invierte en cada operación sucesiva. Enseguida se ilustrará que este resultado indica algo respecto al comportamiento del sistema bajo la operación de reversibilidad del tiempo.

Reversibilidad del tiempo es el proceso por medio del cual las variables temporales, que describen la evolución de un sistema microscópico, se cambian por sus negativas; es decir, se cambia la dirección del flujo del tiempo, como si una película se corriera al revés. La reversibilidad del tiempo, al aplicarse al experimento del $^{27}Co^{60}$ en su versión normal de la figura 16-15, invierte la dirección del vector que describe el movimiento del electrón y también invierte el sentido de circulación de la corriente en la espira. Así pues, después de la inversión del tiempo, la relación entre la dirección y la circulación es la misma que antes de la operación, a saber, la relación de una espiral izquierda. Por lo tanto, en lo que se refiere a la reversibilidad del tiempo, no puede aprenderse directamente nada respecto al hecho de que existe una asimetría con respecto al plano de la espira de corriente en el patrón de emisión electrónica del decaimiento del $^{27}Co^{60}$ siendo esta asimetría el resultado que permite la definición de una dirección de emisión preferencial. En la operación de inversión del tiempo, la descripción del

experimento no puede alterarse de modo esencial en ningún caso, así que el experimento no dice nada directamente acerca de que si el decaimiento β distingue o no entre las direcciones en que fluye el tiempo. Sin embargo, lo hace indirectamente. Esto se debe al hecho de que existe un teorema muy general de la teoría cuántica relativista que demuestra que, para *cualquier* sistema regido por *cualquier* interacción que sea conforme al requisito relativista de que una causa debe preceder al efecto, el resultado de realizar sucesivamente la operación de conjugación de carga de paridad, y de inversión del tiempo, es equivalente a dejar la descripción esencial del comportamiento del sistema invariante. Como consecuencia de este, denominado *teorema CPT*, los incisos correspondientes a la conservación de la paridad y de la conjugación de la carga, -, que se encuentra en la tabla para la interacción débil requieren que la reversibilidad del tiempo sea + para dicha interacción.

Así pues, en el decaimiento β la interacción débil no distingue entre las direcciones en que fluye el tiempo, a pesar de que distingue entre un sistema y su imagen especular y entre un sistema y su antisistema. Sin embargo, en 1964 Christenson y colaboradores encontraron que en la interacción débil, el decaimiento de la componente de tiempo de vida grande del sistema degenerado K^0, $\overline{K^0}$ presenta una violación, no muy frecuente, de la invariancia de la reversibilidad del tiempo. Generalmente el decaimiento produce tres piones, de un modo tal que parecería indicar, como en el decaimiento β, que debiera tener signo - en la conservación de la paridad y en la conjugación de la carga, y consecuentemente, signo + en la reversibilidad del tiempo. Sin embargo, aproximadamente 0.1% de los decaimientos producen dos piones y deberán ser indicados por símbolos para la paridad y conjugación de carga de los cuales uno es - y el otro +. De acuerdo con el teorema CPT, ésto quiere decir que en estos decaimientos el signo correspondiente a la reversibilidad del tiempo debe ser -. Es decir, existe evidencia de que por medio de un modo raro de decaimiento en la interacción débil de las componentes de largo tiempo de vida del sistema K^0, $\overline{K^0}$ la *naturaleza puede distinguir a un nivel microscópico la dirección en que fluye el tiempo.* Parecería que este sorprendente resultado debiera ser de gran significación. Cuál es esa significación es algo que todavía no se entiende. Tampoco se entiende su origen.

El hecho de que aparezcan tres signos + correspondientes a la paridad, conjugación de carga y reversibilidad del tiempo tanto para la interacción fuerte como para la electromagnética, en la tabla 17-2, inspira confianza en la validez del teorema CPT utilizado para obtener este resultado. El teorema dice, en esencia, que el producto de estos tres símbolos en todos los casos deberá ser +. Existen medidas independientes para cada caso, de modo que el hecho de que el producto de los tres símbolos sea realmente + para las interacciones fuerte y electromagnética, confirma el teorema. Un experimento independiente para la reversibilidad del tiempo en la interacción fuerte consiste en comparar las secciones de una reacción como

$$^{12}\mathrm{Mg}^{24} + {}^{2}\mathrm{He}^{4} \rightarrow {}^{13}\mathrm{Al}^{27} + {}^{1}\mathrm{H}^{1}$$

y la sección para la reacción inversa

$$^{13}\mathrm{Al}^{27} + {}^{1}\mathrm{H}^{1} \rightarrow {}^{12}\mathrm{Mg}^{24} + {}^{2}\mathrm{He}^{4}$$

ajustando los vectores de impulso del núcleo incidente y del núcleo blanco en la segunda reacción de modo que sean iguales pero opuestos a los de los núcleos producto y residual de la primera reacción. Para la interacción electromagnética, la evidencia para la invariancia de la reversibilidad del tiempo se puede obtener estudiando el comportamiento de un sistema de cargas en interacción con cierto conjunto de condiciones iniciales, y después estudiando su comportamiento cuando se invierten los vectores de impulso iniciales. Cada comportamiento se ve exactamente como una película corriendo al revés del otro comportamiento, ya que la interacción electromagnética no puede distinguir la dirección del tiempo y por lo tanto opera del mismo modo en ambos casos.

Existen relaciones entre cada ley de conservación y una propiedad de simetría de un espacio físico o matemático. Por ejemplo, la simetría del espacio físico con respecto al desplazamiento (el hecho de que el espacio *vacío* del universo tiene las mismas propiedades en un punto que en otro) se puede demostrar que es la base de la conservación del impulso lineal. Sin embargo, estas relaciones generalmente sólo pueden entenderse con base en una teoría cuántica más sofisticada que la que se puede utilizar aquí.

17.8 Familias de Partículas Elementales

En la tabla 17-3 se enlistan las partículas elementales, (exceptuando al gravitón) que son estables, o bien que decaen únicamente por medio de las interacciones débil o electromagnética. Las partículas relacionadas se agrupan en familias: el fotón, los leptones, los mesones, y los bariones. Tanto los leptones como los bariones son fermiones, y tanto los fotones como los mesones son bosones. Los bariones, que son más masivos que los nucleones a veces se llaman *hiperones,* aunque parece que este término está pasando de moda. Los mesones y los bariones, i.e., las partículas que participan en la interacción fuerte, son llamados colectivamente *hadrones,* y este término es ampliamente utilizado. Los puntos que integran la tabla son: nombre de familia; símbolo de la partícula; masa en reposo; tiempo de vida; carga Q; spin intrínseco s; número leptónico L_e o L_μ, ;número bariónico B; y para mesones y bariones, paridad intrínseca P; isopín T; componente z del isospín T_z ; extrañeza S. También se muestran la asignación convencional para la paridad de los bariones y la asignación $T_z = 0$ para el fotón.

Todos los leptones y los bariones tienen antipartículas, a pesar de que no se muestran en la tabla. En comparación con un leptón o con un barión, los "números cuánticos" de su antipartícula tienen los siguientes valores: Q opuesta; la misma s; L_e o L_μ o B opuestas; y para bariones, P opuesta; la misma T; T_z opuesta; S opuesta. Una antipartícula posee la misma masa en reposo y también el mismo tiempo de vida que la partícula. Estas dos igualdades son predichas por el teorema CPT, y han sido verificadas experimentalmente.

Las antipartículas de los mesones se muestran en la tabla. Ya se ha discutido el hecho de que la K^- y la $\overline{K^0}$ son, respectivamente, las antipartículas de la K^+ y K^0. Examinando la tabla se podrá confirmar que la relación entre los números cuánticos de la K^+ y la K^-, y de la K^0 y la $\overline{K^0}$, concuerdan con las reglas para partículas - antipartículas, citadas anteriormente, para leptones y bariones, excepto que la paridad intrínseca no cambia en el caso de la K, anti - K. Las reglas de paridad partícula - antipartícula predichas (y experimentalmente confirmadas), reflejan el hecho de que los mesones son bosones y que los bariones son fermiones. Continuando con el examen de la tabla se encuentra que la relación entre los números cuánticos del π^+ y del π^- es la misma que la que existe entre los números cuánticos de la K^+ y la K^-. Por lo tanto, se puede afirmar que el π^- es la antipartícula del π^+. Desde este punto de vista, también se puede afirmar que el π^0 es su propia antipartícula, y que lo mismo se aplica para el η^0 y para el η'.

En la tabla 17-3, no aparecen un número grande de entidades de tiempo de vida muy corta que pueden ser, o nó, llamadas partículas elementales. Como ejemplo, en los experimentos de

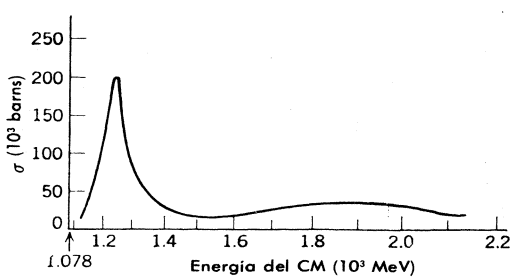


FIGURA 17-20
Sección de dispersión para mesones π^+ sobre protones, como función de la energía total relativista, respecto al centro de masas del sistema.

TABLA 17-3. Las partículas elementales.

Nombre genérico	Símbolo la partícula	Masa en reposo (MeV/c^2)	Tiempo de vida (seg.)	Carga Q	Spin intrínseco	Número leptónico L_e or L_μ	Número bariónico B	Paridad intrínseca P	Isospín T	Componente z del isospín T_z	Extrañeza S
Fotón	γ	0	Estable	0	1	0	0			0	
Leptones	ν_e	0	estable	0	1/2	+1	0				
	ν_μ	0	estable	0	1/2	+1	0				
	e^-	0.511	estable	−1	1/2	+1	0				
	μ^-	105.7	2.2×10^{-6}	−1	1/2	+1	0				
Mesones	π^+	139.6	2.6×10^{-8}	+1	0	0	0	Impar	1	+1	0
	π^0	135.0	0.9×10^{-16}	0	0	0	0	Impar	1	0	0
	π^-	139.6	2.6×10^{-8}	−1	0	0	0	Impar	1	−1	0
	K^+	493.8	1.2×10^{-8}	+1	0	0	0	Impar	1/2	+1/2	+1
	K^0	497.8	8.6×10^{-11} y 5.2×10^{-8}	0	0	0	0	Impar	1/2	−1/2	+1
	$\overline{K^0}$	497.8		0	0	0	0	Impar	1/2	+1/2	−1
	K^-	493.8	1.2×10^{-8}	−1	0	0	0	Impar	1/2	−1/2	−1
	η^0	549	2.5×10^{-19}	0	0	0	0	Impar	0	0	0
	η'	958	$> 10^{-21}$	0	0	0	0	Impar	0	0	0
Bariones	p	938.3	estable	+1	1/2	0	+1	Par	1/2	+1/2	0
	n	939.6	930	0	1/2	0	+1	Par	1/2	−1/2	0
	Λ^0	1116	2.5×10^{-10}	0	1/2	0	+1	Par	0	0	−1
	Σ^+	1189	8.0×10^{-11}	+1	1/2	0	+1	Par	1	+1	−1
	Σ^0	1192	$<10^{-14}$	0	1/2	0	+1	Par	1	0	−1
	Σ^-	1197	1.5×10^{-10}	−1	1/2	0	+1	Par	1	−1	−1
	Ξ^0	1315	3.0×10^{-10}	0	1/2	0	+1	Par	1/2	+1/2	−2
	Ξ^-	1321	1.7×10^{-10}	−1	1/2	0	+1	Par	1/2	−1/2	−2
	Ω^-	1672	1.3×10^{-10}	−1	3/2	0	+1	Par	0	0	−3

dispersión pión-nucleón realizados por Fermi y otros en 1952, se encontró que existía una fuerte resonancia en las secciones de dispersión cuando la energía de bombardeo del pión era 195 MeV. En la figura 17-20 se muestra la sección de dispersión π^+, p como función de la energía total, respecto del centro de masas, del sistema, incluyendo las masas en reposo del pión y del nucleón. Como el π^+ posee $T = 1$, $T_z = +1$, y la p posee $T = 1/2$, $T_z = +1/2$, el sistema se encuentra en el estado $T = 3/2$, $T_z = 3/2$. (El sistema π^-, p en el estado $T = 3/2$, $T_z = -1/2$ presenta la misma clase de resonancia en la sección de dispersión, a la misma energía, proporcionando así evidencia adicional para la conclusión de que aunque la interacción fuerte depende de T, no depende de T_z). La anchura a media altura del máximo de la resonancia Γ, cuyo pico ocurre a una energía total de 1236 MeV, es aproximadamente 120 MeV. Esto quiere decir que el pión y el protón deben formar un ente compuesto que se mantiene unido durante un tiempo $t \sim \hbar/\Gamma \sim 10^{-15}$ eV-seg $/10^8$ eV $\sim 10^{-23}$ seg. Si dicha entidad se moviera a una velocidad característica de $c/3$, mantendría su existencia en una distancia $d \sim ct/3 \sim 10^8$ m/seg x 10^{-23} seg $\sim 10^{-15}$ m, que es el alcance de la interacción fuerte. Por lo tanto, es razonable hasta cierto punto hablar de que un pion y un protón forman una partícula de tiempo de vida muy corta, que se denomina Δ (1236). Posee un conjunto definido de números cuánticos: $s = 3/2, B = 1, P =$ par, $T = 3/2, S = 0$. Sin embargo, su masa no está definida y se podría expresar, en el mejor de los casos, como 1236 ± 60 MeV$/c^2$. Existen también cierto número de las llamadas *resonancias bariónicas,* que son más masivas. Algunas de ellas serán indicadas más adelante en la figura 17-23.

También existen *resonancias mesónicas.* Por ejemplo, el mesón ρ ha sido observado como resonancia en la interacción de un π^- y un π^+ en el estado final de reacciones tales como

$$\pi^- + p \rightarrow \pi^- + \pi^+ + n$$

El mesón ρ tiene una masa en reposo de 765 ± 50 MeV. Es decir, la anchura de la resonancia y por lo tanto, su tiempo de vida es aproximadamente igual que para la Δ (1236). Los números cuánticos del mesón ρ son: $s = 1, B = 0, P =$ impar, $P = 1, S = 0$. El mesón ρ decae de vuelta en dos piones. Un ejemplo similar es el *mesón* ω cuya masa en reposo es 783 ± 6 MeV$/c^2$, y los mismos números cuánticos, excepto que $T = 0$. También existen otras resonancias mesónicas más masivas, con spin que llegan hasta 2. Se cree que el mesón ω y posiblemente alguno de los otros más masivos, sean responsables por la coraza de repulsión en el potencial nucleónico. Las partículas en forma de resonancias, tanto bariónicas como mesónicas, son todas de tiempo de vida muy corta, ya que decaen por medio de la interacción fuerte por la que fueron formadas.

Ejemplo 17-5. Discutir cada una de las siguientes reacciones en términos de las leyes de conservación que aparecen en la tabla 17-2 y de los números cuánticos de las partículas que aparecen en la tabla 17-3

(a) $\pi^- + p \rightarrow \Sigma^+ + K^-$

Esta reacción es imposible ya que requiere un cambio en la extrañeza de 2.

(b) $K^- + p \rightarrow \Omega^- + K^+ + K^0$

Esta es la reacción en la que Ω^- se produjo por primera vez, ya que tiene $S = -3$. Conserva la extrañeza ya que $S = +1$ para la K^+ y la K^0, mientras que $S = -1$ para la K^-. Se conservan la carga y el número bariónico. Asimismo se conservan el impulso angular y la paridad ya que el estado final sólo puede tener una unidad de impulso angular orbital. (Recuérdese que la paridad asociada con el impulso angular orbital, está dada por $(-1)^l$.) Como el isospín y su componente z también se conserva, se puede ver que la reacción puede proceder vía interacción fuerte. Si este no fuera el caso, la sección de dispersión sería demasiado pequeña para que fuera observable.

(c) $\Omega^- \rightarrow \Xi^0 + \pi^-$

En este caso, la carga y el número bariónico se conservan. El impulso angular y la paridad también se conservan ya que el estado final contiene una unidad de impulso angular orbital. Como los valores de T son 0 para la Ω^-, 1/2 para la Ξ^0, y 1 para el π^-, se puede ver que debe existir un cambio en el isospín de cuando menos $\Delta T = 1/2$. Asimismo, T_z es 0 para la Ω^-, + 1/2 para la Ξ^0, y - 1 para el π^-, de modo que la componente z del isospín cambia en $\Delta T_z = 1/2$. La extrañeza también cambia, por la cantidad $S = 1$. Estos cambios en los números cuánticos permiten que el decaimiento proceda por medio de la interacción media, pero prohiben que proceda más rápidamente por medio de las interacciones fuerte o electromagnética.

(d) $\pi^+ + p \rightarrow p + p + \bar{n}$

En primer lugar, se deben determinar los números cuánticos del antineutrón $\bar{n}$. Aplicando las reglas antes citadas a la tabla, se encuentra: $Q = 0, s = 1/2, B = -1, P =$ impar, $T = 1/2$, $T_z = +1/2, S = 0$. Por observación se puede demostrar que todos los números cuánticos se conservan en la reacción, de modo que pueden realizarse por medio de la interacción fuerte.

(e) $\bar{n} \rightarrow \bar{p} + e^+ + \nu_e$

Si esta reacción procede, debe hacerlo por medio de la interacción débil ya que ν_e no participa en ninguna de las otras. La carga se conserva ya que $Q = -1$ para el $\bar{p}$. El número bariónico total es igual a - 1 antes y después, de modo que también se conserva. El número leptónico electrónico se conserva, ya que tiene los valores - 1 para el e^+ y +1 para el ν_e. El impulso angular puede conservarse. La paridad no está definida para leptones, sin embargo, la paridad no es una consideración significativa en una interacción débil que implifica leptones. Lo mismo es cierto para el isospín y la extrañeza. Así pues, la reacción puede llevarse a cabo por medio de la interacción débil. Obsérvese que es justamente la conjugada de la carga del decaimiento β del neutrón.

(f) $\Lambda^0 \rightarrow n + \gamma$

Esta reacción, si puede ocurrir, obviamente deberá ser electromagnética. Como $T_z = 0$ para la Λ^0 y γ, mientras que $T_z = -1/2$ para la n, se puede ver que no puede ocurrir ya que T_z se conserva en la interacción electromagnética. Esta conclusión concuerda con el experimento y es una de las razones por las que al fotón se le asigna $T_z = 0$. ◀

17.9 Hipercarga y Cuarks

Al correlacionar las propiedades de los mesones y los hadrones, resulta útil emplear un número cuántico Y denominado *hipercarga*, en lugar del número cuántico para la extrañeza S. La hipercarga se define como

$$Y = S + B \tag{17-44}$$

donde B es el número bariónico. Dado que B se conserva en todas las interacciones, las reglas relativas a la conservación de S se aplican directamente a Y. Gell-Mann y otros, descubrieron

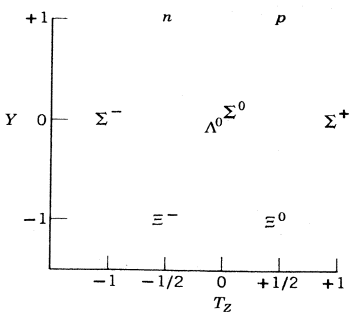


FIGURA 17-21
Octete de bariones con spin 1/2 y paridad par.

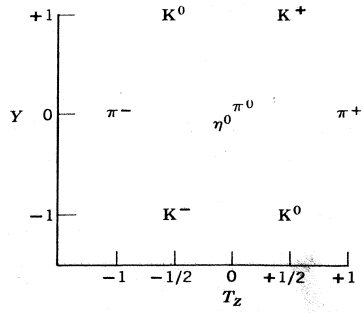


FIGURA 17-22
Octete de mesones con spin 0 y paridad impar.

que una gráfica de Y contra T_z para bariones de spin 1/2, forma un patrón simétrico simple, y que dicha gráfica para mesones con spin 0 forma el mismo patrón. Estos patrones en forma de octetes se muestran en las figuras 17-21 y 17-22. Se denominan octetes, porque contienen ocho partículas, incluyendo dos que ocupan la misma posición central.

La simetría de estos patrones sugirió una extensión de la teoría de matrices utilizada para describir las propiedades matemáticas detalladas del spin y del isospín. Dicha extensión se denomina *teoría del SU (3)*, e implica el grupo de matrices de 3×3 "Unitarias Especiales". El patrón de octete, incluyendo la doble ocupación de la posición central, es uno de los patrones a los que conducen las propiedades de simetría de este grupo. También conducen a un patrón de singulete y a un patrón de decuplete. El mesón η' ocupa dicho singulete, dando cuenta, por lo tanto, de los nueve mesones conocidos. Existen también nueve bariones, de los cuales el Ω^- no ha sido aún tomado en cuenta. No podría ser un patrón de singulete, ya que el SU(3) demuestra que ésto no sería posible para un barión con un spin 3/2. En lugar de lo anterior, se agrupa con otros bariones de spin 3/2 en el decuplete que se muestra en la figura 17-23. Todos los miembros de este patrón de decuplete son resonancias, excepto por el Ω^-.

La significación de la teoría del SU(3) fue demostrada por primera vez por Gell-Mann y Okubo al predecir la masa en reposo y los números cuánticos de la Ω^- antes de que fuera observada experimentalmente. La idea implificada en la predicción de la masa es que en ausencia de interacciones fuerte o electromagnética, todos los miembros de un patrón tendrían la misma energía de masa en reposo, pero la interacción fuerte elimina parte de esta degeneración dividiendo la energía de masa de acuerdo con Y, y la interacción electromagnética elimina la degeneración restante dividiendo la energía de masa de acuerdo con T_z. Por lo tanto,

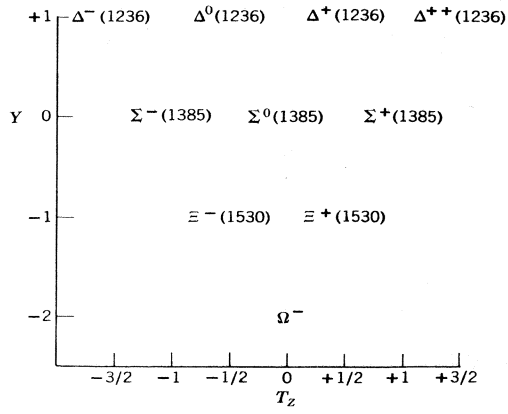


FIGURA 17-23
Decuplete de bariones con spin 3/2 y paridad par.

la masa de la Ω^- podría predecirse extrapolando la dependencia con Y de la masa de los miembros del decuplete conocidos previamente.

En las figuras 17-21 hasta 17-23, se puede ver que el patrón de octete, que es un hexágono, y el patrón de decuplete, que es un triángulo, ambos tienen una simetría rotacional de desdoblamiento triple respecto a su centro. Esto, desde luego, es cierto para el patrón de singulete, ya que sólo es un punto en el centro. Esta observación condujo a que Gell-Mann postulara la existencia de *Cuarks*, conjunto de tres partículas que, en diversas combinaciones, pueden formar todos los mesones y bariones. La tabla 17-4 muestra los números cuánticos no-enteros correspondientes a los tres cuarks q_1, q_2, q_3. También se postulan anti-cuarks, $\bar{q}_1$, $\bar{q}_2$, $\bar{q}_3$, Cada uno de ellos posee valores Q, B, P, T_z, e Y que son opuestos a los de los correspondientes cuarks.

Entonces, todos los mesones se pueden formar de una combinación de uno de los tres cuarks, y uno de los tres anti-cuarks. Las nueve combinaciones posibles, muestran los nueve mesones con spin 0, si se supone que el cuark y el anti-cuark se encuentran en un estado $^1S_0$ en el cual, su impulso angular total es 0, ya que no poseen impulso angular orbital y sus spins son esencialmente antiparalelos. Además, las resonancias mesónicas, cuyos spins pueden llegar a 2, pueden ser explicadas si se permite que el sistema cuark-anticuark pueda estar en los estados $^3S_1$, o bien, en $^3P_0$, $^3P_1$, y $^3P_2$,

Los bariones se pueden considerar como combinaciones, en el estado S, de tres de los tres cuarks. Existen 27 de dichas combinaciones, y cada una de éstas posee números cuánticos que corresponden a uno de los bariones conocidos. Estos se encuentran agrupados en los patrones de octete y decuplete que se muestran en las figuras 17-21 y 17-23, con otro octete y un singulete más.

El segundo octete y el singulete, se encuentran poblados por resonancias bariónicas.

A pesar de que el modelo de cuarks parece impresionante, existen algunos problemas con él. Uno de los problemas tiene que ver con el hecho de que el decuplete de bariones con spin 3/2 y paridad par, estaría compuesto de tres cuarks en el mismo estado S con spins "paralelos", siendo generalmente dos o tres de ellos idénticos; e.g., $\Omega^- = q_3q_3q_3$. Sin embargo, ésto no sería posible si los cuarks son spin 1/2 fueran fermiones, como lo son todos los demás ejemplos de entidades conocidas con spin 1/2. Otro problema es que, a pesar de los esfuerzos considerables que se han desarrollado, nadie ha sido capaz hasta ahora de detectar un cuark libre. Si un cuark fuera liberado de un sistema ligado de dos o tres cuarks, en una colisión de alta energía producida en un acelerador o por rayos cósmicos, sería estable, ya que su carga no-entera no le permitiría decaer en ninguna otra cosa sin que se viole la conservación de la carga. Además, la carga fraccionaria lo haría fácil de detectar.

Posiblemente la razón por la cual los cuarks libres no se han visto todavía, es que no se han utilizado colisiones suficientemente energéticas para producirlos. Es decir, puede ser que tengan energías de masa en reposo extremadamente altas y se unan para formar mesones o bariones con energías de enlace igualmente altas, de modo que se requieren energías muy grandes para liberarlos. Experimentos recientes que implican la dispersión de electrones de alta energía, por protones, han dado indicaciones de que el protón está compuesto de partículas puntuales. Estas partículas han sido denominadas *partones*, pero, de hecho, podrían ser cuarks ligados. Es de esperar que investigaciones futuras, tanto teóricas como experimentales, aclararán el papel de los cuarks en la física cuántica.

TABLA 17-4. Los cuarks.

Símbolo del cuark	Q	s	B	P	T	T_z	Y
q_1	+2/3	1/2	+1/3	Par	1/2	+1/2	+1/3
q_2	−1/3	1/2	+1/3	Par	1/2	−1/2	+1/3
q_3	−1/3	1/2	+1/3	Par	0	0	−2/3

PREGUNTAS

1. ¿Por qué el $^3P_1$ no es un componente del estado base del deuterón?. ¿Qué se puede decir respecto a $^1S_0$?

2. ¿Qué experimentos pueden realizarse para probar la existencia de un sistema estable de dos protones?. ¿De dos neutrones?

3. En el sistema de referencia del centro de masas, la sección diferencial de dispersión en el caso neutrón-protón es isotrópica para bajas energías. Describir cualitativamente el comportamiento de la sección diferencial de dispersión en un sistema de referencia en que el protón-blanco se encuentre inicialmente en reposo.

4. Al considerar el comportamiento mecánico-cuántico de un sistema con dos partículas idénticas, se habla de intercambio de las *etiquetas* de las partículas. Al considerar la dispersión neutrón-protón, se habla de intercambio de las *partículas*. ¿Cuál es la razón para esta diferencia?

5. ¿Por qué es la sección diferencial de dispersión protón-protón necesariamente simétrica respecto a 90º, en el sistema de referencia del centro de masas?

6. Explicar por qué la sección diferencial de dispersión es isotrópica si en la interacción que produce la dispersión sólo participa el estado $l = 0$.

7. Una parte muy grande de lo que se sabe acerca de las fuerzas que actúan entre átomos, se ha obtenido del estudio de los estados ligados del átomo más simple, el hidrógeno. ¿Por qué sólo una pequeña parte de lo que se sabe acerca de las fuerzas que actúan entre núcleos, se ha obtenido del estudio de los estados ligados del núcleo más simple, el deuterio?

8. ¿Por qué resulta apropiado utilizar el nombre de isospín para el concepto discutido en la sección 17-3?

9. ¿Podría, el principio de exclusión, ser expresado en términos de isospín?. Ver la figura 17-14.

10. ¿Existe alguna imagen física de como el impulso de un mesón π transferido entre los campos de dos nucleones conduce a una fuerza de *atracción* entre ellos? Desde el punto de vista del principio de incertidumbre relacionado con la posición y el impulso, ¿es realista esperar que sea factible construir dicha imagen?

11. ¿Qué especies de mesones π se intercambian en la dispersión protón-protón?. ¿En la dispersión neutrón-neutrón?

12. ¿Qué partícula quedaría si un protón emitiera un mesón π^-?. ¿Si un neutrón emitiera un mesón π^+?. ¿Por qué el campo de un protón no puede contener un mesón π^- y el campo de un neutrón no puede contener un mesón π^+?

13. ¿Por qué se cree que la coraza de repulsión del potencial nucleónico resulta del intercambio de mesones más pesados que el pion?

14. ¿Qué ejemplos se han considerado, en capítulos anteriores, de la conservación del número de fermiones y de la no-conservación del número de bosones, en un sistema aislado?

15. Exactamente, ¿qué se quiere decir con la afirmación de que un pion posee paridad intrínseca impar?

16. La primera verificación experimental de la dilatación del tiempo relativista fué proporcionada por la comparación de la rapidez de decaimiento de muones de rayos cósmicos "en vuelo", con la rapidez de decaimiento de muones en reposo. ¿Cuál sería un modo posible de realizar dicha comparación?

17. Los muones de rayos cósmicos se han utilizado con la intención de descubrir cámaras funerarias escondidas en las pirámides egipcias, de modo muy similar en que los rayos-X son utilizados para

descubrir imperfecciones internas, en una fundición metálica, ocasionadas por burbujas de gas. ¿Por qué se utilizaron muones?

18. ¿Existen algunas partículas, aparte de los neutrinos y los antineutrinos, que posean helicidades definidas?. Explicar.

19. ¿Por qué todos los cuantos del campo deben ser bosones?

20. Existen cuatro mesones K explícitamente diferentes. ¿Por qué no se les asigna el número cuántico de isospín $T = 3/2$ de modo que pudieran constituir un cuarteto de isospín?

21. Exactamente, ¿qué es lo que especifica el número cuántico de extrañeza S?

22. ¿Por qué resulta difícil reconciliar la copiosa producción de partículas Λ^0 y K con su lento decaimiento, sin el concepto de extrañeza? ¿Cómo es que la extrañeza proporciona una reconciliación?

23. ¿Existe algún conflicto entre la afirmación de que la magnitud del isospín no se conserva en la interacción electromagnética y la afirmación de que la componente z del isospín se conserva en esa interacción?

24. Considérese que el experimento de decaimiento β que se ilustra en la figura 16-15, se ve en un espejo colocado por debajo del núcleo (el espejo en posición horizontal) en lugar de en un espejo colocado a un lado del núcleo (el espejo en posición vertical). Explicar cómo se modificarían los argumentos en el texto relacionados con la apariencia de la imagen especular del conjugado de carga, pero de tal modo que conduzcan a la misma conclusión.

25. Dar un ejemplo de un sistema macroscópico cuyo comportamiento es invariante a la reversibilidad del tiempo, y de un sistema macroscópico cuyo comportamiento no es invariante ante esta operación.

26. ¿Por qué se puede afirmar que el mesón π^0 es su propia antipartícula?. ¿Tienen partículas todas las antipartículas?. ¿Qué pasa con el fotón?

27. ¿Le parece razonable al lector que una resonancia bariónica o mesónica sea una partícula elemental? ¿exactamente qué es una partícula elemental?

28. En algunas ocasiones se dice que la extrañeza no es el número cuántico más fundamental que puede utilizarse, ya que la conservación de la extrañeza es realmente una combinación de la conservación de la hipercarga y de la conservación del número bariónico. Explicar.

29. ¿Existen algunos constituyentes de la materia que no se puedan describir en términos de combinaciones de cuarks y anti-cuarks?

PROBLEMAS

1. Consultar la discusión del potencial centrífugo en la sección 15-8, y entonces: (a) escribir la ecuación que determina la dependencia radial $R(r)$ de la eigenfunción del deuterón, evaluando (7-17) para $l = 0$. (b) Demostrar que también puede escribirse,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + V(r)u(r) = Eu(r)$$

donde

$$u(r) = rR(r)$$

(c) comparar la anterior con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para los problemas unidimensionales. (d) Dar una interpretación física de $u^*(r)u(r)$. (e) Evaluar y dar una interpretación física de la masa reducida μ.

2. (a) En la ecuación obtenida en el problema 1, tomar el potencial nucleónico $V(r)$ como un pozo cuadrado de radio r' y profundidad V_0, como en la figura 17-2. (b) Demostrar por sustitución que la solución general de la ecuación obtenida es

$$u(r) = A \operatorname{sen} k_1 r + B \cos k_1 r \qquad r < r'$$

$$u(r) = Ce^{-k_2 r} + De^{k_2 r} \qquad r > r'$$

(c) Evaluar k_1 y k_2 en términos de μ, V_0, y la energía de amarre del deuterón ΔE.

3. (a) Aplicar a la solución general obtenida en el problema 2, las condiciones de que $R(r)$, y por lo tanto $u(r)$, debe ser finita, continua, y univaluada, con primeras derivadas con las mismas propiedades. (b) Demostrar que la aplicación de estas condiciones en $r = 0$, $r = r'$, y $r \to \infty$ conduce a la relación

$$\frac{\sqrt{2\mu(V_0 - \Delta E)}}{\hbar} \cot\left[\frac{\sqrt{2\mu(V_0 - \Delta E)}}{\hbar} r'\right] = -\frac{\sqrt{2\mu\,\Delta E}}{\hbar}$$

4. Demostrar, por sustitución, que la relación obtenida en el problema 3 tiene una solución con $\Delta E =$ 2.2 MeV, energía de amarre observada del deuterón cuando el potencial tiene un radio $r' = 2.0$F y una profundidad $V_0 = 36$ MeV.

5. (a) Utilizar los cálculos en los problemas del 1 al 4 para calcular la dependencia radial de la eigenfunción para el estado base del deuterón en un potencial de radio 2.0F y profundidad de 36 MeV. (b) Dibujar el potencial $V(r)$ y la función $u(r) = rR(r)$. (c) Dibujar también la densidad de probabilidad radial $P(r)$.

6. Un nucleón incide sobre otro nucleón que inicialmente se encuentra estacionario. Su energía cinética, que es también la energía cinética total del sistema en ese marco de referencia, es K. Demostrar que la energía cinética total del sistema, en un marco de referencia en el que el centro de masas del sistema se encuentra estacionario, es $K/2$.

7. (a) Demostrar que para un potencial nucleónico de radio $r' = 2$F, el valor máximo del número cuántico de impulso angular orbital es $l_{\max} = 1$ a menos que la energía cinética de cada nucleón exceda aproximadamente 30 MeV en el sistema de referencia del centro de masas. (b) Demostrar también que $l_{\max} = 2$ a menos que las energías cinéticas excedan aproximadamente 60 MeV.

8. (a) Calcular el valor de $l_{\max}$ para un protón de 50 MeV que incide sobre un núcleo de peso atómico $A = 100$. Tomar el radio r' del potencial óptico modelo que actúa sobre el protón, como la suma del radio correspondiente a la mitad del valor de la distribución de carga $a = 1.07\,A^{1/3}$ F y el alcance de las fuerzas nucleónicas 2.0 F. (b) Calcular también $\theta \simeq \lambda/r'$, y comparar con el ángulo entre mínimos adyacentes en la sección diferencial de dispersión que se muestra en la figura 16-25.

9. (a) Utilizar los resultados de mediciones de dispersión electrónica, presentados en la figura 15-6, para calcular el número total de nucleones por unidad de volumen en el interior de un núcleo típico. (b) Calcular después, la distancia centro a centro promedio entre nucleones. (c) Comparar lo anterior con el radio de la coraza de repulsión del potencial nucleónico y con el alcance de la fuerza nucleónica.

10. El principio de incertidumbre en términos de impulso y posición produce un efecto que tiende a evitar el colapso de un núcleo, que ocurriría si los potenciales nucleónicos no tuvieran regiones de repulsión. (a) Demostrar que este principio demanda que la energía cinética de un nucleón típico confinado a un núcleo de radio r' debe ser cuando menos K, donde

$$K \propto + \frac{1}{r'^2}$$

(b) A pesar de K se vuelve más positiva a medida que r' disminuye, la energía potencial V del nucleón típico se vuelve más negativa si los potenciales nucleónicos son puramente de atracción y el núcleo se encuentra suficientemente colapsado de modo que la separación entre todos los pares de

nucleones sea menor que el alcance del potencial nucleónico. Demostrar que bajo estas circunstancias

$$V \propto -\frac{1}{r'^3}$$

(c) Demostrar después que la energía total de un nucleón típico, $E = K + V$, se volvería más negativa al disminuir r' aún más de modo que el núcleo continuaría colapsándose, a pesar del principio de incertidumbre, si los potenciales nucleares no tuvieran regiones repulsivas.

11. Utilizar la información contenida en las figuras 16-14 y 16-34 para asignar valores de T y T_z a los estados base de los análogos isobáricos de: (a) $^1H^3$ $^2He^3$; (b) $^3Li^7$ $^4Be^7$.

12. (a) Estimar el tiempo máximo que un mesón π puede existir en el campo de un nucleón aislado antes de ser absorbido por ese nucleón. (b) Estimar cuántos mesones π puede haber en un instante dado en el campo, a distancias del nucleón aproximadamente iguales al alcance de la fuerza nucleónica, 2F. (c) Estimar cuántos puede haber a distancias aproximadamente iguales al radio de la coraza de repulsión, 0.5F.

13. La vida media del π^0 se determina con mayor precisión, estudiando el decaimiento partiendo del reposo, del mesón K^+ en el modo $K^+ \rightarrow \pi^0 + \pi^+$. La distancia promedio que recorre el π^0 en un bloque de emulsión fotográfica antes de decaer, se mide por medio del modo de decaimiento, fácilmente observable, $\pi^0 \rightarrow e^+ + e^- + \gamma$ y de la velocidad calculada con que se mueve el π^0 se obtiene su tiempo de vida Dado que el tiempo de vida es 0.9×10^{-16} seg., predecir la distancia promedio que recorre el π^0 antes de decaer.

14. En el sistema de referencia de laboratorio (LAB), la partícula 1 se encuentra en reposo con energía relativista total E_1, y la partícula 2 se mueve hacia la derecha con energía relativista total E_2 e impulso p_2. (a) Utilizar las ecuaciones relativistas de transformación energía-impulso,

$$p'_x = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}(p_x - vE/c^2)$$
$$p'_y = p_y$$
$$p'_z = p_z$$
$$E' = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}(E - vp_x)$$

para demostrar que el sistema de referencia en el que el centro de masas relativistas del sistema se encuentra en reposo, se mueve hacia la derecha con velocidad

$$v = c\frac{cp_2}{E_1 + E_2}$$

relativa al sistema de laboratorio, y demostrar que el impulso total del sistema es cero en este sistema de referencia del centro de masas (CM). (b) Supóngase que las dos partículas tienen las mismas masas en reposo m_0, y sea la energía relativista total del sistema, en el marco de referencia de laboratorio, E_{LAB}. Calcular E_{CM}, la energía relativista total del sistema en el marco del centro de masas, y demostrar que

$$E_{\mathrm{CM}} = \sqrt{2m_0c^2E_{\mathrm{LAB}}}$$

15. Utilizar la relación citada en el problema 14-b para evaluar la energía cinética, en el sistema de laboratorio, del protón incidente, para la cual, el proceso de producción del par protón antiprotón, (17-28), se vuelve energéticamente posible.

16. (a) Estimar la sección de dispersión para un antineutrino electrónico que incide sobre un protón, con una energía de 1 MeV, para producir la reacción

$$\bar{\nu}_e + p \rightarrow n + e^+$$

(Sugerencia: (i) Suponer que existe cierta probabilidad de que la reacción ocurra cuando la distancia entre $\bar{\nu}_e$ y p es menor que la longitud de onda de de Broglie, $\bar{\nu}_e$ del λ. Estimar después el intervalo temporal durante el cual pueden estar tan próximos. (ii) Estimar la probabilidad P como el cociente de ese intervalo de tiempo y el tiempo característico de la reacción $\sim 10^3$ seg. (Es la inversa de $n + e^+ \rightarrow p + \bar{\nu}_e$, que es una alternativa de $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$; el balance detallado requiere que los tres tengan el mismo tiempo característico que, como se ve, es igual al tiempo de vida media del dec aimiento del neutrón) (iii) Tómese la sección de dispersión como $\sim P\lambda^2$. (b) Utilizar esta estimación para evaluar la trayectoria media libre de un $\bar{\nu}_e$ de 1 MeV, en plomo, justificando de la suposición de que la sección de dispersión para su interacción con un núcleo de plomo $\sim 10^2$ veces más grande que su sección de dispersión para su interacción con un protón.

17. (a) ¿Por qué no está permitido el decaimiento del mesón ρ^0 en dos mesones π^0 ? (b) Suponiendo que el deuterón incidente tiene suficiente energía, ¿por qué la reacción $d + d \rightarrow {}^2\mathrm{He}^4 + \pi^0$ no está permitida? (c) ¿Por qué el decaimiento de un mesón π^+ en un e^+ y en un γ no es posible? (d) ¿Qué impide que la reacción $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ ocurra cuando el neutrón es parte de un deuterón?

18. Para cada una de las siguientes reacciones definir cuál es la interacción más rápida por medio de la cual las leyes de conservación permiten que proceda. Si la reacción es prohibida por todas las interacciones, decir por qué:

(a) $p \rightarrow \pi^+ + e^+ + e^-$
(b) $\Lambda^0 \rightarrow p + e^-$
(c) $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_e + \nu_\mu$
(d) $n + p \rightarrow \Sigma^+ + \Lambda^0$
(e) $p + \bar{p} \rightarrow \gamma + \gamma$
(f) $p + \bar{p} \rightarrow n + \overline{\Sigma^0} + K^0$
(g) $K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0 + \pi^0$

19. Describir cada uno de los bariones de la tabla 17-3 por una combinación de tres cuarks que conduzca a los números cuánticos correctos.

20. Asociar cada una de las nueve combinaciones posibles cuark-anticuark con un mesón de la tabla 17-3 discutiendo cualquier ambigüedad que resulte.

Apéndices

Apéndice A

Teoría especial de la relatividad

Nuestro propósito al incluir este apéndice, es desarrollar aquellos resultados de la teoría de la relatividad especial de Einstein que se necesitarán en el estudio de la física cuántica. Por supuesto que esto es lo que muchos estudiantes han estudiado de relatividad en sus cursos de mecánica clásica y/o electromagnetismo, con anterioridad a iniciar sus estudios sobre física cuántica. Para estos estudiantes, este apéndice puede ser útil como un reposo. Para los otros, será útil como un tratamiento conciso de los resultados más importantes de la relatividad.

Las transformaciones de Galileo y la mecánica

En la física clásica, el estado de un sistema mecánico en algún instante se puede describir por completo construyendo un sistema de referencia y utilizarlo para especificar las coordenadas y las derivadas temporales de las coordenadas para las partículas que componen el sistema en ese instante. Si se conocen las masas de las partículas y las fuerzas que actúan entre ellas las ecuaciones de Newton del movimiento hacen posible el calcular el estado del sistema para cualquier tiempo futuro en términos de su estado en el instante inicial. A menudo, es deseable que durante o después de estos cálculos se especifique el estado del sistema en términos de un nuevo sistema de referencia que se mueve en traslación (es decir, que no gire) en relación al primer sistema y con velocidad constante. Surgen dos preguntas: (1) ¿Cómo se transformará la descripción del viejo al nuevo sistema de referencia? (2) ¿Qué le sucede a las ecuaciones que rigen el comportamiento del sistema cuando se hace la transformación? Estas preguntas son con las que trata la teoría de la relatividad especial. (En la teoría general, que no se necesitará en este estudio de la física cuántica, las transformaciones implican aceleración de un sistema con relación al otro).

La figura A-1 muestra una partícula de masa m, cuyo movimiento bajo la influencia de la fuerza **F** está especificado en términos de un sistema de referencia primo y uno no primo. El sistema primo se mueve en relación al no primo con velocidad constante **v** en una dirección que, por construcción, es la dirección positiva de los ejes x, y x' colineales. Por definición, los tiempos t' y t medidos en los dos sistemas son ambos cero en el instante en el que el plano $y'z'$ coincide con el plano $y\ z$. Con estos 4 sistemas existen dos conjuntos de 4 números (x',y',z',t') y (x,y,z,t), que se pueden utilizar igualmente bien para

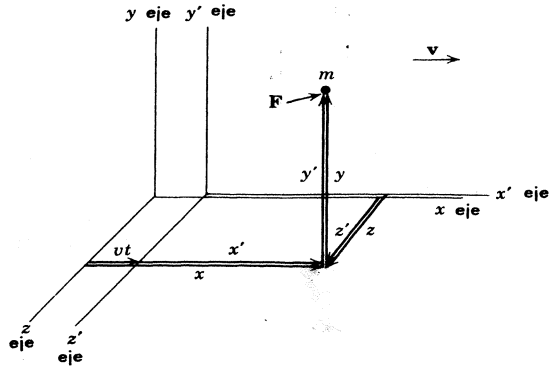


FIGURA A-1

Sistema de referencia x', y', z', t' que se mueve en traslación con velocidad constante v relativa a un sistema, x, y, z, t. Los ejes x y x' se suponen colineales.

especificar las coordenadas de las partículas para cualquier instante. ¿Cuáles son las relaciones entre estos conjuntos de números? Según la física clásica éstas son:

$$\begin{aligned} x' &= x - vt \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= t \end{aligned} \qquad \text{(A-1)}$$

Se conocen como las *transformaciones galileanas*. Los argumentos sencillos de la física clásica que conducen a ellas son:

1. Si se define que los ceros de las escalas de tiempo utilizadas en los diferentes sistemas son los mismos para cualquier tiempo y lugar, entonces en la física clásica ambas escalas de tiempo permanecerán invariables para todos los tiempos y todos los lugares, así que $t' = t$.

2. Ya que por construcción los planos $x'y'$ y xy siempre coinciden, se tiene $z' = z$; y de manera similar $y' = y$.

3. Ya que en el intervalo de tiempo entre 0 y $t' = t$ el plano $y'z'$ se mueve en la dirección positiva una distancia vt, la coordenada x' se hará menor que la coordenada x por esta misma cantidad. Así que $x' = x - vt$.

Las transformaciones galileanas constituyen la respuesta que la física clásica da a la primera pregunta planteada.

La respuesta a la segunda pregunta está dada en la mecánica clásica cuando se utilizan las transformaciones de Galileo para convertir las ecuaciones de Newton en el sistema x, y, z, t.

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F_x \qquad m\frac{d^2y}{dt^2} = F_y \qquad m\frac{d^2z}{dt^2} = F_z \qquad \text{(A-2)}$$

Cualesquiera que sea la forma que tengan estas ecuaciones, en el sistema x', y', z', t'. Obsérvese que para que (A-2) sea válido el sistema x,y,z,t, deberá ser una *sistema inercial;* es decir , uno en el cual un cuerpo que no está afectado por ninguna fuerza, e inicialmente en reposo, permanezca en reposo.

Diferenciando cada una de las tres primeras ecuaciones (A-1) dos veces respecto a t y utilizando la cuarta para escribir $t = t'$ es trivial demostrar que

$$\frac{d^2x'}{dt'^2} = \frac{d^2x}{dt^2} \qquad \frac{d^2y'}{dt'^2} = \frac{d^2y}{dt^2} \qquad \frac{d^2z'}{dt'^2} = \frac{d^2z}{dt^2}$$

En otras palabras, la aceleración de la masa m medida en el sistema primo es la misma que cuando se la mide en el sistema no primo. Por supuesto, la razón es que dos sistemas relacionados por una transformación de Galileo no están acelerados entre sí, de modo que la transformación no cambia la medida de la aceleración. Por lo tanto,

$$F_{x'} = F_x \qquad F_{y'} = F_y \qquad F_{z'} = F_z$$

Debido a que la componente de la fuerza F que actúa sobre m en la dirección del eje x' o x es la misma vista en cualesquier sistema y similarmente para sus otras componentes. Evaluando las componentes no primadas de la aceleración y de la fuerza en (A-2) en términos de sus contrapartes primadas, pero no haciendo nada con la masa, ya que en la física clásica la masa es una propiedad intrínseca de una partícula cuyo valor no puede depender del sistema de referencia se encuentran las ecuaciones del movimiento en el sistema primado.

$$m\frac{d^2x'}{dt'^2} = F_{x'} \qquad m\frac{d^2y'}{dt'^2} = F_{y'} \qquad m\frac{d^2z'}{dt'^2} = F_{z'} \tag{A-3}$$

Observe que (A-3) tiene exactamente la misma forma matemática que (A-2). Por lo tanto, parte de la respuesta a la segunda pregunta es que las ecuaciones de Newton, que gobiernan el comportamiento del sistema mecánico, no cambian cuando se hace una transformación galileana. El sistema x,y,z,t era un sistema inercial ya que $d^2x/dt^2 = d^2y/dt^2 = d^2z/dt^2 = 0$ si $\mathbf{F} = 0$. De (A-3) se deduce que x', y', z', t' también es un sistema inercial ya que $d^2x'/dt'^2 = d^2y'/dt'^2 = d^2z'/dt'^2 = 0$ si $\mathbf{F} = 0$.

Como las ecuaciones de Newton son idénticas en cualesquiera dos sistemas inerciales y como el comportamiento de un sistema mecánico está gobernado por estas ecuaciones, se sigue que el comportamiento de todos los sistemas mecánicos será idéntico en todos los sistemas inerciales, no obstante que estos sistemas se mueven a velocidad constante uno respecto a otro. Esta predicción se verifica por una amplia variedad de evidencias experimentales.

Las transformaciones galileanas y el electromagnetismo

A continuación nos preguntamos sobre el comportamiento de los sistemas electromagnéticos cuando se realiza una transformación galileana. Los fenómenos electromagnéticos se tratan en la física clásica en términos de las ecuaciones de Maxwell, las cuales gobiernan sus comportamientos así como las ecuaciones de Newton gobiernan el comportamiento de los fenómenos mecánicos. En realidad, no se procederá a aplicar transformaciones galileanas a las ecuaciones de Maxwell, como se hizo a las ecuaciones de Newton ya que este cálculo es complicado; en vez de esto se mencionarán los resultados: las ecuaciones de Maxwell cambian su forma matemática bajo una transformación galileana, en marcado contraste con el comportamiento de las ecuaciones de Newton. También se estudiará el significado físico de estos resultados.

Como probablemente sepa el estudiante, las ecuaciones de Maxwell predicen la existencia de disturbios electromagnéticos que se propagan a través del espacio en la manera característica del movimiento ondulatorio. Los físicos del siglo XIX quienes eran muy mecanicistas en su visión, creían que era evidente que la propagación de las ondas predicha por las ecuaciones de Maxwell requiriera la existencia de un medio de propagación mecánico. De la misma manera que las ondas de sonido se propagan a través de un medio mecánico, el aire, así que de

acuerdo con su punto de vista, las ondas electromagnéticas se deberían propagar a través de un medio mecánico al que llamaron *el éter*. A este medio de propagación se le exigían propiedades muy extrañas con objeto de que se ajustara a ciertos hechos conocidos. Por ejemplo, no debería tener masa, ya que las ondas electromagnéticas tales como la luz, pueden viajar en el vacío; pero debería tener propiedades elásticas para ser capaz de trasmitir las vibraciones inherentes a la idea del movimiento ondulatorio. No obstante, los físicos de esta era pensaron que el concepto del éter era más atractivo que la alternativa de ondas electromagnéticas propagándose sin la ayuda de un medio de propagación.

Se supuso que las ecuaciones electromagnéticas en la forma presentada por Maxwell eran válidas para el sistema de referencia en reposo respecto al éter, el llamado *sistema del éter*. Una solución de estas ecuaciones lleva a una predicción de la magnitud de la velocidad de propagación de las ondas electromagnéticas en el vacío. El resultado es 2.998×10^8 m/seg$\equiv c$, que concuerda dentro del error experimental con el valor de la velocidad de la luz que había sido medido por Fizeau. Sin embargo, en un sistema de referencia moviéndose con velocidad constante con respecto al éter, las ecuaciones de Maxwell cambian de forma cuando se usan las transformaciones de Galileo para evaluarlas en dicho sistema en movimiento. Como era de esperarse, cuando se utilizan estas ecuaciones cambiadas para obtener una predicción de la velocidad de la propagación de la onda electromagnética que debería medirse en el sistema en movimiento respecto al éter, se encontró que la velocidad tenía una magnitud diferente de c.

Los cálculos complicados que predicen la velocidad de la luz medida en un sistema de referencia que se mueve con respecto al éter, realizados mediante una transformación de Galileo de las ecuaciones de Maxwell para el sistema en movimiento, y resolviéndolas en este sistema, llevan a la predicción simple

$$v_{\text{sist. móvil cra. éter}} = v_{\text{luz cra éter}} - v_{\text{luz cra. sist. móvil}} \qquad \text{(A-4)}$$

donde *cra* significa con respecto a, y $v_{\text{luz cra. éter}} = c$. La predicción está de acuerdo con dos ideas físicas simples:

1. La luz se propaga con una velocidad de magnitud fija c con respecto a su medio de propagación, el éter, justo como las ondas sonoras se propagan con una velocidad de magnitud fija con respecto a su medio de propagación, el aire.

2. La velocidad de la luz con respecto a un sistema que se mueve respecto al éter se puede encontrar a partir de una adición normal de vectores de velocidad relativa.

Deberá apuntarse que los argumentos que justifican la adición vectorial de volocidades son realmente los mismos que justifican la transformación galileana. Por ejemplo, en un caso en el que todo el movimiento es a lo largo del eje x' o x, se pueden obtener (A-4) inmediatamente, mediante una diferenciación respecto al tiempo de la primera de las ecuaciones (A-1), utilizando también la cuarta $t' = t$.

En resumen la física teórica a fines del siglo XIX estaba basada en tres cosas fundamentales: las ecuaciones de Newton, las ecuaciones de Maxwell y las transformaciones galileanas. Casi cualquier cosa que pudiera derivarse de estas tres concordaba bien con los experimentos que se habían realizado para entonces. En relación con las preguntas que se han analizado, ellas predecían que los sistemas de referencia en movimiento uniforme con respecto a otros eran completamente equivalentes, según los fenómenos mecánicos que se trataban, pero respecto a los fenómenos electromagnéticos no eran equivalentes; solamente existía un sistema, el sistema del éter, en el cual la velocidad de la luz tenía una magnitud con un valor numérico c.

El experimento de Michelson-Morley

En 1887 Michelson y Morley realizaron un experimento que resultó ser de gran importancia. El experimento se diseñó para investigar el movimiento de la tierra respecto al sistema de referencia del éter. Puesto que la tierra se mueve alrededor del sol, parecería poco realista hacer una suposición *a priori* acerca de que el sistema del éter viaja con la tierra, y como se indicará posteriormente, las observaciones experimentales de aquel tiempo estaban en contra de todas las suposiciones. Sería mucho más razonable suponer que el sistema del éter estaba en reposo con respecto al centro de masas del sistema solar o al centro de masas del universo. En el primer caso, la velocidad de la tierra respecto al sistema del éter tendría una magnitud del orden de 10^4 m/seg; en el segundo caso, la magnitud de la velocidad debería ser algo mayor. La idea básica del experimento era medir la velocidad de la luz en dos direcciones perpendiculares en un sistema de referencia fijo a la tierra. Consideraciones sobre los impulsos según la teoría clásica, como se resume mediante la adición vectorial (A-4), mostrarán que la teoría predice que las velocidades deberán tener magnitudes diferentes cuando la luz viaja en direcciones diferentes con relación a la dirección de movimiento del observador a través del éter.

A pesar de que la diferencia en las dos mediciones de la velocidad de la luz se esperaba pequeña, debido a que la velocidad de la tierra respecto al éter es pequeña comparada con la velocidad de la luz y respecto al éter, Michelson y Morley construyeron un dispositivo que contenía un interferómetro que lo hacía bastante más sensible que lo necesario para detectar y medir la diferencia. Para su gran sorpresa, no les fue posible detectar ninguna diferencia. Ellos y muchos otros investigadores repitieron las mediciones con equipo mejorado pero nunca observaron el efecto. A pesar de las predicciones de la teoría clásica, el experimento de Michelson y Morley mostró que la velocidad de la luz tiene la misma magnitud c, medida en direcciones perpendiculares en un sistema de referencia que, presumiblemente, se mueve a través del sistema de referencia del éter.

Estos resultados atrajeron la atención de muchos físicos, y varios de ellos trataron de dar explicaciones que concordaran con los resultados de Michelson y Morley. Las teorías más notables fueron *"la hipótesis del arrastre del éter"* y *"la teoría de la emisión"*.

La hipótesis del arrastre del éter supone que el sistema del éter estaba atado localmente a todos los cuerpos de masa finita. Era atractiva porque podía explicar los resultados de Michelson y Morley y no involucraba modificaciones de las teorías existentes. Pero no podía ser aceptada por varias razones, la principal tenía que ver con el fenómeno astronómico llamado aberración estelar. Para 1700 ya se conocía que las posiciones aparentes de las estrellas se movían anualmente en círculos de diámetros muy pequeños. Este es un efecto puramente cinemático debido al movimiento de la tierra alrededor del sol; de hecho, es el mismo que el efecto que causa que una gota de lluvia vertical parezca caer a un ángulo con la vertical para un observador en movimiento. De esta analogía es fácil ver que la aberración estelar no se presentaría si la luz viajara con velocidad de magnitud fija respecto al sistema del éter y si ese sistema fuera arrastrado por la tierra.

En la teoría de la emisión, las ecuaciones de Maxwell se modifican de tal modo que la velocidad de la luz se mantiene asociada con la velocidad de su fuente. Esto también explicaría los resultados de Michelson y Morley puesto que sus fuentes luminosas estaban fijas al interferómetro utilizado para medir la diferencia de velocidad de la luz, pero se podría rechazar debido a los conflictos que presenta

con las medidas astronómicas concernientes a las estrellas binarias. Las estrellas binarias son pares de estrellas que giran rápidamente alrededor de sus centros de masas comunes. Considere un par en un instante en el que una se mueve hacia la tierra y la otra se aleja de ella, entonces, si la teoría de la emisión es válida, con relación a la tierra, la velocidad de la luz proveniente de una de las estrellas sería mayor que desde la otra. Esto causaría que las estrellas aparentaran moverse en órbitas muy poco usuales. Sin embargo, en 1913 De Sitter demostró que los movimientos observados en las estrellas binarias se explican adecuadamente por la mecánica newtoniana cuando la velocidad de la luz que éstas emiten se considera con una magnitud independiente de su movimiento.

Toda la evidencia experimental (incluyendo la evidencia proveniente de varios experimentos contemporáneos de extremada precisión) sólo concuerda con la conclusión de que no existe un *sistema de referencia especial*, el sistema del éter, con la única propiedad de que la velocidad de la luz medida en ese sistema tiene una magnitud igual a cero. Así como para los sistemas inerciales y los fenómenos mecánicos, *todos los sistemas* en movimiento relativo con velocidad constante son equivalentes en cuanto a que la velocidad de la luz medida en cada uno de estos sistemas tiene la misma magnitud c. Para resumir la *evidencia experimental:*

La velocidad de la luz en el vacío es independiente del movimiento del observador y del movimiento de la fuente.

Postulado de Einstein

En 1905, Albert Einstein fue el primero en impulsar a que los físicos abandonaran el concepto erróneo e infructuoso del éter. En esencia él aceptaba el hecho de que la luz se propaga a través del vacío, y que el vacío, en realidad ¡está vacío! Sin el sistema de referencia del éter, el único sistema de referencia que puede tener algún significado para un observador que mide la velocidad de la luz es el sistema fijo a él mismo. Entonces, no es sorprendente que un observador obtenga, en todos los casos, el mismo resultado numérico c, cuando mide la magnitud de la velocidad de la luz. Como un postulado Einstein estableció:

Las leyes de los fenómenos electromagnéticos, así como las leyes de la mecánica, son las mismas en todos los sistemas de referencia inerciales, sin importar el hecho de que uno se mueva respecto a otro. En consecuencia, todos los sistemas inerciales son completamente equivalentes para todos los fenómenos.

Este postulado requería que Einstein modificara las ecuaciones de Maxwell o las transformaciones de Galileo, ya que las dos juntas implican lo contrario del postulado. Sin embargo, como en 1905 la teoría de la emisión parecía aceptable, él optó por no modificar las ecuaciones de Maxwell y entonces se vio forzado a modificar las transformaciones de Galileo. Este fue un movimiento muy audaz. La creencia intuitiva en la validez de las transformaciones galileanas era tan fuerte que sus contemporáneos, nunca las cuestionaron fuertemente. Además, como se verá posteriormente, las transformaciones tan distintas que adoptó Einstein en substitución de las de Galileo están basadas en consideraciones físicas realistas, mientras que las transformaciones galileanas son claramente no realistas. Otra indicación de la audacia de Einstein es que las primeras consideraciones implican que cualquier modificación a las transformaciones galileanas requerirían alguna modificación que compensara las ecuaciones de Newton, de modo que el postulado continúe satisfaciéndose para la mecánica. Pronto se verá a qué resultado conduce ésto, pero primero se habrán de estudiar las nuevas ecuaciones de transformación.

Simultaneidad

Considérese la cuarta de las transformaciones de Galileo (A-1) que es

$$t' = t$$

La ecuación establece que existe la misma escala de tiempos para todos los sitios y todo instante en cualesquiera dos sistemas de referencia moviéndose uniformemente uno respecto al otro. Esto equivale a decir que existe una escala universal de tiempo para esos sistemas. ¿Esto es cierto? Para definirlo se deberá investigar en forma realista los procedimientos utilizados para la medición del tiempo.

Primero se atacará el problema de definir una escala de tiempos para un solo sistema. Ahora el proceso básico involucrado en cualquier medición del tiempo es una medida de simultaneidad. Como Einstein escribió: "Si digo: El tren llega aquí a las 7 en punto, quiero decir algo como esto: el que la manecilla pequeña de mi reloj apunte el 7 y la llegada del tren son eventos simultáneos". Por supuesto que no existe ningún problema en determinar la simultaneidad de eventos que ocurren esencialmente en un mismo lugar, como el tren y el reloj *cercano* utilizado para medir la hora de llegada. Pero existe un problema para determinar la simultaneidad de eventos que ocurren en sitios *separados*. De hecho, este es el meollo del problema de poner una escala de tiempo para un sistema de referencia. Para tener una escala de tiempo válida para un sistema de referencia completo se habría de tener un gran número de relojes distribuidos en todo el sistema del tal modo que en cualquier punto que se quisiera medir se pudiera utilizar un reloj muy cercano al punto deseado. Estos relojes deberían estar sincronizados; esto es, se debería ser capaz de decir de cualesquiera de estos dos relojes separados A y B.: "La manecilla pequeña del reloj A y la manecilla pequeña del reloj B apuntaron las 7 simultáneamente".

Probablemente, ahora se le ocurran al estudiante un gran número de métodos para determinar la simultaneidad en sitios separados. Todos estos métodos seguramente implican la transmisión de señales entre los dos puntos. Si se tuviera a nuestra disposición un método para transmitir señales con velocidad infinita, no habría más problema en determinar la simultaneidad de eventos que ocurren en sitios distantes, que el que existe para hacerlo para eventos que ocurren en el mismo lugar. Aquí es donde falla la transformación de Galileo al suponer implícitamente la existencia de tal método de sincronización. De hecho, no existe ese método y puesto que se está de acuerdo en ser realista al desarrollar una escala de tiempo, se deberá utilizar señales reales para sincronización.

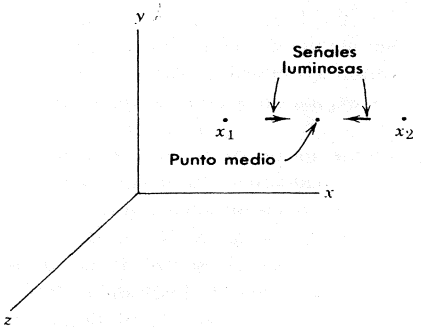


FIGURA A-2
Ilustración de la definición de Einstein de simultaneidad.

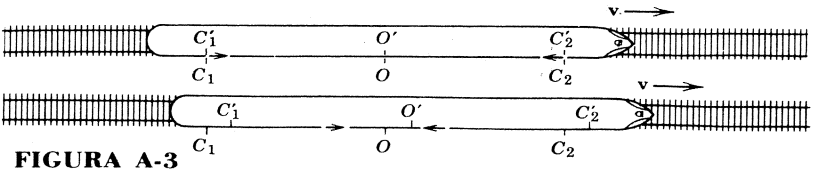


FIGURA A-3

Dos vistas sucesivas de un tren moviéndose con velocidad constante v desde el punto de vista de un observador 0 en la tierra. Las flechas pequeñas indican los destellos luminosos.

Evidentemente, la señal más apropiada será la luz (u otra señal electromagnética) ya que estas tienen la misma velocidad de propagación bajo cualquier circunstancia. Esta propiedad simplifica enormemente el proceso de determinar la simultaneidad. Entonces se llega a la *definición Einsteniana de simultaneidad de eventos separados:*

Un evento que ocurre al tiempo t_1 y el punto x_1 es simultáneo con un evento que ocurre al tiempo t_2 y en el punto x_2 si señales luminosas emitidas en t_1 desde x_1 y en t_2 donde x_2 llegan simultáneamente al punto medio entre x_1 y x_2.

Esta definición, que se muestra en la figura A-2, establece que dos eventos separados son simultáneos para un observador situado en el punto medio si él ve que ocurren simultáneamente. Observe que en la teoría de Einstein, la simultaneidad en el tiempo no tiene un significado absoluto, independiente de la localización espacial, como lo tiene en la teoría clásica. La definición mezcla íntimamente los tiempos t_1, y t_2 y las coordenadas espaciales x_1, y x_2.

Una consecuencia de esto es que dos eventos que son simultáneos cuando se observan desde un sistema de referencia por lo general no son simultáneos cuando se observan desde un segundo sistema de referencia que se está moviendo en relación al primero. Para ver esto, considere un "experimento imaginario" muy simple, adaptado de uno utilizado por Einstein. La figura A-3 ilustra la siguiente secuencia de eventos desde el punto de vista de un observador O que está en reposo en relación a tierra. Dicho observador tiene colocadas dos cargas de dinamita C_1 y C_2 de modo que las distancias $\overline{OC_1}$ y $\overline{OC_2}$ son iguales. Utilizando como detonador una señal luminosa que envía simultáneamente hacia C_1 y C_2 los hace explotar simultáneamente en su sistema de referencia. (El está utilizando un recíproco de la definición anotada arriba). Suponga que lo hace de tal modo que, en su sistema, las explosiones ocurren cuando está de frente a O' un observador situado en un tren que se mueve con una velocidad muy grande v. Las explosiones dejan marcas C_1' y C_2' sobre un lado del tren. Después del experimento, O' puede medir las distancias $\overline{O'C_1'}$ y $\overline{O'C_2'}$. Las encontrará iguales ya que de otra forma el espacio no sería homogéneo. Las explosiones también producen destellos luminosos. El observador O recibirá los destellos simultáneamente, confirmando que en su sistema las explosiones ocurrieron simultáneamente. Sin embargo O' recibirá el destello que se originó en C_2' antes de recibir el destello proveniente de C_1' simplemente porque el tren se movió durante el tiempo finito requerido para que la luz lo alcance. Puesto que las explosiones ocurrieron en puntos equidistantes de O' pero las señales luminosas no se recibieron simultáneamente, él deberá concluir que en su sistema de referencia las explosiones no fueron simultáneas.

Estos desacuerdos en la simultaneidad conducen a resultados interesantes. Desde el punto de vista de O, $\overline{C_1C_2} = \overline{C_1'C_2'}$. Pero de acuerdo con O', C_2' pasa por C_2 antes de que C_1' pase por C_1 ya que él recibió primero la señal de C_2'

Por lo tanto O' deberá concluir que $\overline{C_1C_2} = \overline{C_1'C_2'}$. Si esto no es evidente, es posible demostrarlo construyendo diagramas que muestran la secuencia de eventos desde el punto de vista de O'. El desacuerdo en la simultaneidad también causará que los dos observadores estén en desacuerdo en el ritmo que tienen los relojes en sus respectivos sistemas de referencia. Como se verá, la naturaleza de sus desacuerdos acerca de las medidas de distancia e intervalos de tiempo son tales que les permite a ambos O y O' el encontrar el mismo valor c para la velocidad de los pulsos de luz que provienen de C_1 y C_2.

Dilación del tiempo y contracción de las longitudes

Considerando aquí un segundo experimento imaginario diseñado para facilitar la evaluación cualitativa de dos efectos relativistas que se apuntaron cualitativamente en el experimento imaginario anterior. Un observador O' que se mueve con velocidad v relativa al observador O, desea comparar un intervalo de tiempo medido con su reloj con una medida del mismo intervalo hecha con relojes que pertenecen a O. El ya ha establecido que, cuando está en reposo respecto a otro observador, todos los relojes corren al mismo ritmo y están sincronizados. Ahora es evidente que, aún en movimiento relativo, la lectura de un reloj O' se puede comparar, sin complicaciones con la lectura de un reloj O que momentáneamente coincide con el de O'. Por lo tanto, las mediciones de un intervalo de tiempo hechas con relojes en los dos sistemas se pueden comparar mediante el procedimiento ilustrado en la figura A-4. O' manda una señal luminosa a un espejo que la refleja de regreso a él. Tanto O como O' registran la emisión de la señal con relojes C_1 y C' que coinciden en este instante. Para registrar el tiempo de su recepción, utilizan los relojes C_2 y C' que coinciden cuando se recibe de regreso del espejo la señal luminosa. Los dos eventos que definen el principio y final del intervalo de tiempo por comparar son la emisión y recepción de la señal luminosa.

El tiempo transcurrido entre estos dos eventos según O' es $T' = 2\Delta t$ De la figura y del teorema de Pitágoras, es evidente que

$$c^2\Delta t^2 = v^2\Delta t^2 + l^2$$

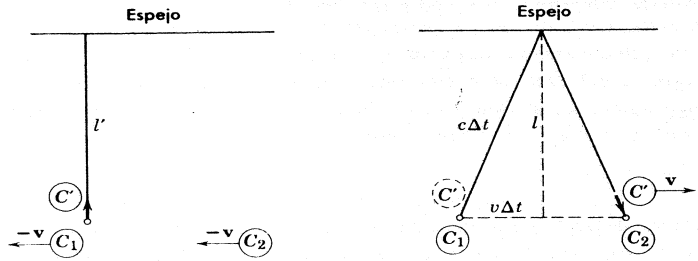


FIGURA A-4
Comparación de un intervalo de tiempo medido por dos observadores. *Izquierda:* La figura muestra la situación en el instante de la emisión de una señal luminosa (flecha pequeña) desde el punto de vista de O'. *Derecha:* La figura muestra la situación en el instante de su recepción desde el punto de vista de O.

donde l es la distancia al espejo medida por O. Resolviendo para Δt, se tiene

$$\Delta t^2 = \frac{l^2}{c^2 - v^2} = \frac{l^2}{c^2} \frac{1}{1 - v^2/c^2}$$

o

$$\Delta t = \frac{l}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Ahora es fácil demostrar que los observadores en movimiento relativo no pueden discrepar acerca de la medida de las distancias *perpendiculares* a la dirección de movimiento ya que los desacuerdos sobre la simultaneidad tienen que ver con la sincronización de las señales con tiempos de propagación finitos en la dirección paralela a la dirección del movimiento relativo. Entonces se tiene $l = l'$ y así

$$\Delta t = \frac{l'}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

de donde se obtiene

$$T = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} T' \qquad \text{(A-5)}$$

Se ha encontrado que la medición de un intervalo de tiempo entre dos eventos que ocurren en el mismo lugar en cierto sistema, resulta *mayor* por un factor $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ en un sistema que se mueve con relación al primero y en el cual, consecuentemente, los dos eventos ocurren en lugares separados. Al intervalo de tiempo medido en el sistema en el cual los eventos ocurren en el mismo lugar se le denomina *tiempo propio* y al efecto involucrado *dilación del tiempo*.

A continuación considere el mismo experimento imaginario pero imagine que en el sistema O coloca una regla para medir con un extremo en el reloj C_1 y el otro en el reloj C_2. Designe por L la longitud de la regla medida en el sistema O, respecto al cual está en reposo. Se desea evaluar L' la longitud de la regla medida en el sistema O'.

En este sistema, la regla se mueve en una dirección paralela a su propia longitud. Puesto que la velocidad de O' respecto a O es v, la velocidad de O y también de la regla, respecto O' será precisamente $-v$. De otra manera, habría una simetría inherente entre los dos sistemas que no está permitida por el postulado de Einstein. T' es el intervalo de tiempo entre el instante cuando O' ve que el extremo anterior de la regla pasa su reloj C' y el instante cuando él ve que el extremo posterior pasa por el reloj. Este intervalo de tiempo está relacionado con la longitud L' de la regla (medida en el sistema O') y con la magnitud v de su velocidad (medida en el mismo sistema) mediante la ecuación

$$L' = vT'$$

También es posible establecer una ecuación que relacione las cantidades correspondientes medidas en el sistema O. En este sistema C' que se mueve con velocidad de magnitud v, recorre la distancia L en el tiempo T. Entonces,

$$L = vT$$

De las dos últimas ecuaciones se obtiene

$$L' = L \frac{T'}{T}$$

Pero el argumento de la dilación del tiempo muestra que

$$\frac{T'}{T} = \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Por lo tanto,

$$L' = \sqrt{1 - v^2/c^2}\, L \tag{A-6}$$

Se ha encontrado que una regla es más corta, por un factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ comparada con su longitud medida en un sistema en el cual está en reposo, cuando la medición de ella se hace en un sistema en el cual se está moviendo paralelo a su propia longitud. A la longitud de la regla medida en el sistema en el cual está en reposo se le denomina *longitud propia* y al efecto *contracción de Lorentz*. Observe que una comparación de (A-6) con la ecuación inmediata anterior, muestra que el factor que relaciona al intervalo de tiempo primo con el no primo es el mismo (y no el recíproco) que el factor que relaciona el intervalo referente primo con el no primo.

La transformación de Lorentz

Ahora se obtendrán las ecuaciones que se usan en la teoría de la relatividad para transformar las variables de espacio y tiempo de un sistema, a otro que se mueve con velocidad constante respecto al primero. Este argumento estará guiado por lo que se ha aprendido, pero en el análisis final existe una derivación independiente basada en la evidencia experimental de que la velocidad de la luz es independiente del movimiento del observador y de la fuente.

Considere un tercer experimento imaginario con los observadores O' y O, con O' moviéndose con relación a O a velocidad de magnitud v en la dirección positiva de los ejes x' y x. Como en la figura A-1 sus planos $x'y'$ y xy coinciden siempre y los orígenes de sus sistemas de referencia coinciden al instante $t' = t = 0$. En este instante, O' enciende un bulbo localizado en su origen y se produce un frente de onda de luz que se extiende en todas direcciones desde el punto de emisión con velocidad de magnitud c. Por lo tanto, según O' al tiempo t' el frente de onda será una esfera centrada en su origen de radio $r' = ct'$. Las coordenadas de cualquier punto sobre el frente de onda para este instante satisfará la ecuación de una esfera.

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2 t'^2 \tag{A-7}$$

Pero igualmente será cierto que según O la luz se extiende en todas direcciones desde el punto de emisión, su origen, con velocidad de magnitud c. Entonces, desde el punto de vista de O el frente de onda al tiempo t también es una esfera de radio $r = ct$ con centro en su propio origen y satisfará la ecuación

$$x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2 \tag{A-8}$$

Se encontrarán relaciones entre los dos conjuntos de variables (x',y',z',t') y (x,y,z,t) que permitan que tanto (A-7) como (A-8) sean válidas, es decir, que transformen una ecuación en la otra.

Según las consideraciones anteriores, se puede suponer la forma siguiente para las ecuaciones de transformación

$$x' = \gamma(x - vt)$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$
$$t' = \gamma(t + \delta) \qquad \text{(A-9)}$$

donde γ es una cantidad adimensional, que presumiblemente contiene la velocidad relativa v entre los dos sistemas y la velocidad de la luz c, y donde δ es una cantidad que también presumiblemente contiene dichas velocidades y que deberá tener dimensiones de tiempo. Pronto se determinarán expresiones para γ y δ pero desde ahora se puede decir que se tendrá $\gamma \to 1$ y $\delta \to 0$ si $v/c \to 0$. La razón es que para $\gamma = 1$ y $\delta = 0$ (A-1) se reduce a la transformación galileana (A-1) lo cual es congruente ya que las transformaciones de Galileo deberán de ser esencialmente correctas si la velocidad relativa v de los sistemas es extremadamente pequeña comparada con la velocidad c de las señales utilizadas para sincronizar los relojes de los sistemas. En la cuarta ecuación se ha agregado el término δ cuando v/c no es pequeño ya que según O' el tiempo de algún evento medido por O deberá ser corregido por un error de sincronización entre el reloj utilizado por O en el evento y el reloj utilizado por O en su origen, tal y como se estudió en el primer experimento imaginario. Habiendo dado cuenta de la sincronización se pone el factor multiplicativo γ en la cuarta ecuación para explicar la discrepancia entre los intervalos de tiempo medidos por O' y O, como se analizó ahí, el mismo factor γ debería aparecer en la primera de las (A-9) a fin de explicar la discrepancia en los intervalos de distancia medidos perpendicularmente a la dirección de movimiento relativo, se supone que sus valores no cambiaron por la transformación.

Ahora se verá si las formas supuestas en (A-9) realmente pueden transformar (A-7) en (A-8) y, de ser así, cuáles son las expresiones requeridas para δ y γ. Utilizando (A-9) para reescribir cada variable en (A-7) en términos de las variables no-primadas, se tiene

$$\gamma^2(x^2 - 2vxt + v^2t^2) + y^2 + z^2 = c^2\gamma^2(t^2 + 2\delta t + \delta^2)$$

Como de esto se debería obtener (A-8), que no contiene un término con la combinación de las variables xt, se deberá cancelar el segundo término en el paréntesis del primer miembro con algo en el segundo miembro. Obtener la cancelación para todo valor de la variable independiente t, sólo será posible con el segundo término en el paréntesis del segundo miembro. Entonces se tendrá

$$-\gamma^2 2vxt = c^2\gamma^2 2\delta t$$

o

$$\delta = -vx/c^2 \qquad \text{(A-10)}$$

Observe que δ tiene dimensiones de tiempo y que $\delta \to 0$ si $v/c \to 0$, como se predijo antes. Una reconsideración del primer experimento imaginario hará aparente el porqué la corrección por sincronización δ es linealmente proporcional a v y a x. Factorizando x^2 y t^2 en los términos restantes después de evaluar δ^2 se obtiene

$$x^2\gamma^2(1 - v^2/c^2) + y^2 + z^2 = c^2t^2\gamma^2(1 - v^2/c^2)$$

Comparando esto con la forma requerida, (A-8) se ve que se obtendrá si

$$\gamma^2(1 - v^2/c^2) = 1$$

o

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{A-11}$$

Observe que γ es adimensional y que $\gamma \to 1$ si $v/c \to 0$, como ya se había predicho. Considerando los resultados de segundo experimento imaginario, no es sorprendente que γ contenga la expresión $\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Por último se utilizan las expresiones (A-10) y (A-11) para evaluar γ y δ en (A-9) y completar con éxito la derivación de la *transformación de Lorentz*

$$\begin{aligned} x' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}(x - vt) \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}(t - vx/c^2) \end{aligned} \tag{A-12}$$

A la transformación de los variables espacio-temporales de la relatividad se le denomina transformación de Lorentz por la razón histórica de que Lorentz había propuesto ecuaciones de la misma forma matemática (pero con un significado físico muy distinto ya que v representa una velocidad respecto al sistema del éter en vez de una velocidad de cualquier sistema inercial respecto a cualesquier otro sistema inercial) en conexión con una teoría clásica de los electrones algunos años antes del trabajo de Einstein.

Como se esperaba, la transformación de Lorentz se reduce a la transformación de Galileo cuando la velocidad relativa v, de los dos sistemas, es pequeña comparada con la velocidad de la luz c. Pero existen diferencias importantes entre las predicciones de la transformación de Galileo y la transformación de Lorentz corregida rigurosamente cuando v es comparable con c. Estas no se habían observado en la física clásica porque no se habían realizado los experimentos adecuados. Muchos resultados experimentales de la física cuántica, algunos de los cuales se analizan en este libro, muestran que efectivamente la transformación de Lorentz es la que describe adecuadamente la naturaleza. Observe que para v más grande que c las ecuaciones de la transformación de Lorentz no tienen significado ya que las coordenadas y tiempo que son reales se transforman en imaginarios. Entonces, c, parece representar el papel de una velocidad límite para todos los fenómenos físicos. Esto se entenderá mejor conforme se avance a la teoría de la relatividad.

La transformación relativista de la velocidad

Considere que la partícula que se muestra en la figura A-5, se mueve con velocidad **u** según se mide en un sistema de referencia O.

Se desea evaluar la velocidad **u'** de la partícula medida en el sistema O' el cual también se mueve en relación a O con velocidad **v**.

Medido en el sistema O, el vector velocidad de la partícula tiene componentes

$$u_x = \frac{dx}{dt} \qquad u_y = \frac{dy}{dt} \qquad u_z = \frac{dz}{dt}$$

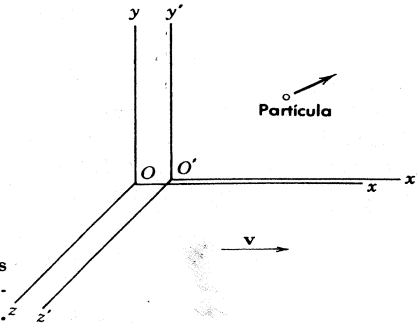


FIGURA A-5
Partícula móvil observada desde dos sistemas de referencia O y O' con el segundo moviéndose con relación al primero a velocidad $\mathbf{v}$.

El vector velocidad, medido en el sistema O' tiene componentes

$$u'_x = \frac{dx'}{dt'} \qquad u'_y = \frac{dy'}{dt'} \qquad u'_z = \frac{dz'}{dt'}$$

Para establecer las relaciones requeridas se toman las diferenciales de la transformación de Lorentz (A-12) recordando que v es constante. Esto conduce a

$$\begin{aligned} dx' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\,(dx - v\,dt) \\ dy' &= dy \\ dz' &= dz \\ dt' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\,(dt - v\,dx/c^2). \end{aligned}$$

Así se obtiene

$$u'_x = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\dfrac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\,(dx - v\,dt)}{\dfrac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\left(dt - \dfrac{v\,dx}{c^2}\right)} = \frac{\dfrac{dx}{dt} - v}{1 - \dfrac{v}{c^2}\dfrac{dx}{dt}} = \frac{u_x - v}{1 - \dfrac{vu_x}{c^2}} \tag{A-13}$$

$$u'_y = \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{\dfrac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\left(dt - \dfrac{v\,dx}{c^2}\right)} = \frac{\dfrac{dy}{dt}}{\dfrac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\left(1 - \dfrac{v^2}{c^2}\dfrac{dx}{dt}\right)} = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2}\,u_y}{1 - \dfrac{vu_x}{c^2}}$$

$$u'_z = \frac{dz'}{dt'} = \frac{dz}{\dfrac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\left(dt - \dfrac{v\,dx}{c^2}\right)} = \frac{\dfrac{dz}{dt}}{\dfrac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\left(1 - \dfrac{v^2}{c^2}\dfrac{dx}{dt}\right)} = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2}\,u_z}{1 - \dfrac{vu_x}{c^2}}$$

Estas ecuaciones constituyen la transformación relativista para la velocidad.

Nótese que conforme v/c se aproxima a cero (A-13) se aproxima a lo que se obtendría de la transformación de Galileo. Otra propiedad interesante es que es imposible escoger $\mathbf{u}$ y $\mathbf{v}$ tales que u', la magnitud de la velocidad medida en el nuevo sistema, sea mayor que c. Considere el ejemplo ilustrado en la figura A-6. Según O, la partícula 1 tiene velocidad $0.8c$ en la dirección positiva de las x y la partícula 2 tiene velocidad $0.9c$ en la dirección negativa de x. Se evalúa la velocidad de la partícula medida en un sistema O' que se mueve en la partícula

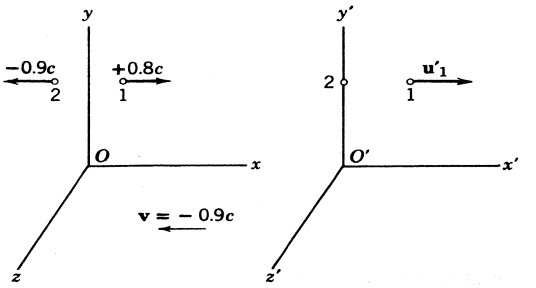


FIGURA A-6
Ilustración de un ejemplo de adición relativista de velocidades.

utilizando la primera de las (A-13) con $u_x = u_1 = 0.8c$ y $v = 0.9c$. Se obtiene

$$u_1' = \frac{0.8c - (-0.9c)}{1 - \dfrac{(-0.9c)(0.8c)}{c^2}} = \frac{1.70c}{1.72} = 0.99c$$

Las ecuaciones de transformación de la velocidad demuestran otro aspecto del hecho de que c actúa como velocidad límite para todos los fenómenos de la física.

Masa relativista

Se ha destacado que la modificación de Einstein de las ecuaciones de transformación necesitará algunas modificaciones de compensación en las ecuaciones de la mecánica, de modo que éstas continúen satisfaciendo los requisitos de no cambiar de forma en una transformación de un sistema inercial a otro que se mueve con relación al primero. Ahora se empezará a desarrollar la nueva mecánica, a la que se le denomina *mecánica relativista.*

Es evidente que es deseable llevar a la mecánica relativista tanto cuanto lo permitan las circunstancias de la mecánica clásica. Se verá que es posible preservar las ecuaciones de Newton del movimiento en una forma equivalente a la dada originalmente por Newton

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \tag{A-14}$$

donde **p** es el impulso de la partícula afectada por la fuerza **F.** También es posible preservar la ley clásica íntimamente relacionada referente a la conservación del impulso de las partículas en un sistema aislado.

$$\left[\sum_{\substack{\text{todas las}\\ \text{partículas}}} \mathbf{p}\right]_{\text{inicial}} = \left[\sum_{\substack{\text{todas las}\\ \text{partículas}}} \mathbf{p}\right]_{\text{final}} \tag{A-15}$$

También será posible preservar la definición clásica del impulso de una partícula

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} \tag{A-16}$$

donde m es su masa y **v** su velocidad. Pero para hacer todo esto, será necesario permitir que la masa de una partícula sea función de la magnitud de su velocidad.

$$m = m(v) \tag{A-17}$$

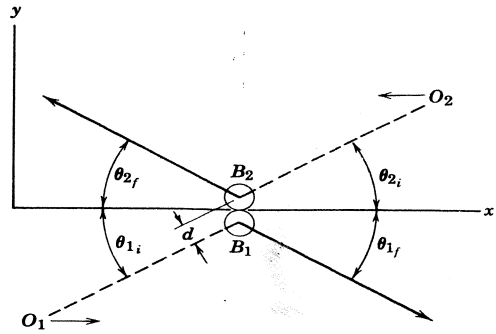


FIGURA A-7
Colisión simétrica entre dos bolas de masa en reposo idéntica.

La forma de esta función está por determinarse. Sin embargo, *a priori* se sabe que habrá de tenerse $m(v) = m_0$ si $v/c \ll 1$, donde la constante m_0 es la masa de la partícula medida clásicamente. La razón es que cuando una velocidad característica se hace mucho menor que la velocidad de la luz, la transformación de Lorentz en cuestión se aproxima a la transformación de Galileo y no se necesita modificar la mecánica.

Para evaluar la función $m(v)$, considere el siguiente experimento imaginario. Según se mide en el sistema x, y, z, t de la figura A-7, los observadores O_1 y O_2 se mueven en direcciones paralelas al eje de las x con velocidades de magnitud igual pero direcciones opuestas. Estos observadores tiene partículas idénticas, por ejemplo, bolas de billar B_1 y B_2, de masa m_0, medida cuando ellas están en reposo. Al pasar, cada uno lanza su bola para pegarle a la otra y lo hacen con una velocidad, que según su punto de vista, está en dirección perpendicular al eje de las x y tiene magnitud u.

Según se observa en el sistema x, y, z, t, B_1 y B_2 se aproximarían por caminos paralelos haciendo ángulos $\theta_{1_i} = \theta_{2_i}$ con el eje x y rebotando por trayectorias a ángulos θ_{1_f} y θ_{2_f} respecto al mismo eje. Suponiendo la conservación del impulso y que la colisión es elástica, es fácil demostrar que $\theta_{1_f} = \theta_{2_f}$ y que la magnitud de la velocidad de las bolas es la misma después y antes de la colisión. El valor real de θ_{1_f} y θ_{2_f} como se muestra en la figura.

Ahora considere el proceso desde el punto de vista de O_1 tal como se muestra en la figura A-8. O_1 lanza B_1 a lo largo de una línea paralela a su eje y con velocidad de magnitud u la que se tomará muy pequeña comparada con c. Esta regresa a lo largo de la misma línea con velocidad de la misma magnitud pero signo opuesto. El observa que B_2 mantiene una componente x de la velocidad justamente igual a v que es la velocidad de O_2 relativa a O_1 que se considerará comparable a c. Según observa O_1 la componente de la velocidad de B_2 que está a lo largo de su eje y cambia de signo durante la colisión pero mantiene constante su magnitud. Para evaluar esta magnitud se supone que la componente y de la velocidad de B_2 medida por O_2 es u, a continuación, se transforma esto al sistema de O_1 con ayuda de la segunda de las (A-13) y se obtiene $u\sqrt{1 - v^2/c^2}$ para la magnitud de la componente y de la velocidad de B_2 medida por O_1.

Los impulsos y de B_1 y B_2 medidos en el sistema O_1 simplemente cambian de signo durante la colisión. Consecuentemente, el impulso total y del sistema aislado de dos bolas que chocan cambia de signo. Si la ley de conservación del impulso (A-15) es válida, el impulso total y antes de la colisión será igual al

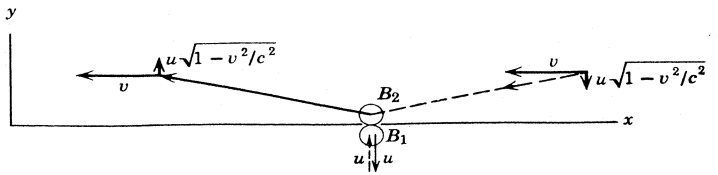


FIGURA A-8
Colisión simétrica observada por O_1. Puesto que se supone a u muy pequeña comparada con v, el ángulo entre las trayectorias de B_2 y el eje x es en realidad mucho menor que el que se muestra.

impulso y después de la colisión. Esto sólo puede ser cierto si el total de la componente y del impulso del sistema medido por O_1 es cero antes de la colisión. Evaluando los componentes y del impulso, como las masas por la componente y de la velocidad según la definición de (A-16) e igualando su suma a cero, se obtiene una ecuación que obviamente es contradictoria en sí misma si se insiste en que ambas masas tengan el valor m_0 que se les midió en sistemas en los cuales estos estaban en reposo. La razón es que según O_1 la magnitud de la componente y de la velocidad de B_1 es u, mientras que la magnitud de la componente y de la velocidad de B_2 es $u\sqrt{1 - v^2/c^2}$.

Sin embargo, si se permite que la masa de una partícula sea función de la magnitud de su vector velocidad total, se puede satisfacer la ley de la conservación del impulso. Puesto que u es muy pequeña comparada con v, la magnitud del vector velocidad de B_2 medido por O_1 es esencialmente v, como se puede ver en la figura A-8. La magnitud del vector velocidad de B_1 de acuerdo con O_1 es justamente u. Entonces O_1 escribiría la ley de conservación del impulso para la componente y como

$$m(u)u - m(v)u\sqrt{1 - v^2/c^2} = 0$$

o

$$m(u) = m(v)\sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Ya que u es muy pequeña comparada con c, se deberá tomar $m(u) = m_0$ y obtener

$$m(v) = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\, m_0 \qquad \text{(A-18)}$$

Una teoría de la mecánica relativista consistente con la conservación del impulso requiere que la masa $m(v)$ de una partícula medida cuando ésta se mueve con velocidad de magnitud v sea mayor que su masa m_0 medida cuando está en reposo por el factor $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. La masa $m(v)$ se llama la *masa relativista* de la partícula y m_0 la *masa en reposo*. Una reconsideración de estos argumentos mostrará que los dos observadores en el experimento pensado miden diferentes valores de la masa de la partícula debido a la diferencia en sus mediciones de sus componentes de la velocidad, perpendiculares a la dirección de su movimiento relativo y que surge debido a la diferencia en sus medidas de los intervalos de tiempo.

Energía relativista

Considere una partícula de masa en reposo m_0 estacionaria inicialmente en $x = 0$. Entonces se le aplica en la dirección x positiva una fuerza de magnitud F y la partícula se mueve bajo la influencia de la fuerza. Es interesante calcular el trabajo total hecho por la fuerza cuando la partícula se mueve a $x = x_f$. Este trabajo se denotará por K. Tomando la definición usual de trabajo

$$K = \int_0^{x_f} F\,dx = \int_0^{t_f} F\frac{dx}{dt}\,dt = \int_0^{t_f} Fv\,dt$$

donde t_f es el instante en el que la partícula llega a x_f. Para evaluar la integral se deberá conocer la forma relativista de las ecuaciones de Newton del movimiento. Con una expresión para el impulso relativísticamente aceptable $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ donde m es la masa relativista, se puede tomar la ecuación de Newton relativista en la forma (A-14)

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d(m\mathbf{v})}{dt}$$

Esto es esencialmente una definición de la fuerza **F**. Utilizándola para evaluar **F** en la integral, se tiene

$$K = \int_0^{t_f} v\frac{dp}{dt}\,dt = \int_0^{p_f} v\,dp$$

Integrando por partes, se obtiene

$$K = [vp]_0^{v_f} - \int_0^{v_f} p\,dv$$

Evaluando la m en $p = mv$ de (A-18) y expresando $v\,dv$ como $d(v^2)/2$, se tiene

$$K = \left[\frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right]_0^{v_f} - \frac{m_0}{2}\int_0^{v_f} \frac{d(v^2)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

La integral es una forma estándar que conduce a

$$K = m_0c^2\left[\frac{v^2/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \sqrt{1 - v^2/c^2}\right]_0^{v_f}$$

que se reduce a

$$K = m_0c^2\left[\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right]_0^{v_f}$$

Evaluando los límites y eliminando el subíndice f para simplificar la notación se tiene

$$K = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0c^2 \qquad \text{(A-19)}$$

Ahora, la ley clásica de la conservación de la energía implica que el trabajo total hecho por la fuerza que actúa sobre la partícula deberá de ser igual a su energía cinética. Se llamará K a la energía cinética de la partícula. Para comprobar en el límite clásico se toma $v/c \ll 1$ y se desarrolla el recíproco de la raíz cuadrada, para obtener

$$K = m_0c^2\left[\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} - 1\right] \simeq m_0c^2\left[1 + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2} - 1\right]$$

o

$$K \simeq \frac{m_0c^2}{2}\frac{v^2}{c^2} = \frac{m_0v^2}{2}$$

Esto concuerda con la expresión clásica para la energía cinética y confirma la identificación de **K** en (A-19) como la *energía cinética relativista.*

Continuando la interpretación de (A-19), se observa que **K** es una función de v que se puede escribir como la diferencia entre un término que depende de v y un término constante, si

$$K(v) = E(v) - E(0)$$

donde $E(v) = m_0c^2/\sqrt{1 - v^2/c^2} = mc^2$ con m la masa relativista y donde $E(O)$ es el valor de $E(v)$ para $v = 0$ es decir, $E(0) = m_0c^2$. Puesto que K es una energía, $E(v)$ y $E(O)$ también serán energías - siendo $E(v)$ alguna energía asociada con la partícula cuando su velocidad es v y $E(O)$ alguna energía asociada con la partícula cuando su velocidad es 0. Para identificar estas energías, se vuelve a escribir la ecuación como

$$E(v) = K(v) + E(0)$$

La conclusión es evidente. Se deberá interpretar $E(v)$ como la energía total de la partícula que se mueve con velocidad v, ya que es la suma de la energía cinética $K(v)$ de la partícula y una energía intrínseca $E(O)$ asociada con la partícula cuando ésta está en reposo. La energía $E(v)$ se llama la energía relativista total y $E(O)$ la energía de la masa en reposo.

Se ha establecido la bien conocida relación de Einstein entre la masa y la energía: *La energía de la masa en reposo $E(O)$ de una partícula es c^2 veces su masa en reposo m_0 .*

$$E(0) = m_0c^2 \qquad \text{(A-20)}$$

y la energía relativista total E de una partícula es c^2 veces su masa relativista m

$$E = mc^2 \qquad \text{(A-21)}$$

La ecuación (A-19) informa sobre la relación entre la energía relativista total E, la energía cinética relativista K, y la energía de masa en reposo m_0c^2

$$E = K + m_0c^2 \qquad \text{(A-22)}$$

Es conveniente tener una expresión para la energía total relativista que contenga explícitamente al impulso p. Lo que se puede obtener evaluando la cantidad

$$m^2c^4 - m_0^2c^4 = m_0^2c^4\left(\frac{1}{1 - v^2/c^2} - 1\right) = m_0^2c^4\,\frac{v^2/c^2}{1 - v^2/c^2}$$

Entonces

$$= \frac{m_0^2 c^2 v^2}{1 - v^2/c^2} = c^2 m^2 v^2 = c^2 p^2$$

o

$$m^2 c^4 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$$

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4 \tag{A-23}$$

No obstante que las selecciones hechas en la teoría de la mecánica relativista parecen razonables, su justificación última se encuentra al comparar las predicciones de la teoría con los experimentos apropiados. En este libro se presentarán varias comparaciones muy exitosas, pero aquí es apropiado apuntar que la existencia de una energía de masa en reposo m_0c^2 no contradice la física clásica. Puesto que en este campo todos los experimentos tratan con sistemas en los que la masa en reposo total es esencialmente constante, las energías de masa en reposo apropiadas se pueden sumar en ambos miembros de las ecuaciones de energía clásica sin destruir su validez.

Sin embargo, la teoría es de mayor interés que el académico puesto que existen procesos naturales importantes en los cuales la masa en reposo total de un sistema aislado cambia de manera significante. Para esos procesos, los experimentos de la física cuántica muestran que el cambio en la energía de la masa en reposo es exactamente compensada por un cambio en la energía cinética, de tal manera que se conserve la energía relativista total del sistema. Esto es, por supuesto, lo que sucede en un reactor nuclear. Consecuentemente, en la relatividad habrán de substituirse las leyes clásicas de conservación de masa y energía por una sola ley de *conservación de la energía relativista total:*

Medido en un sistema de referencia dado, la energía relativista total de un sistema aislado permanece constante.

Se finaliza con este desarrollo breve de la relatividad, estableciendo que cálculos explícitos demuestran que ni la ecuación de Newton expresada en (A-14), ni las ecuaciones de Maxwell cambian de forma ante una transformación de Lorentz de un sistema de referencia a otro que se mueve en relación al primero. Sin embargo, estos cálculos demuestran que la fuerza en el caso de la ecuación mecánica y los campos eléctrico y magnético en el caso de las ecuaciones electromagnéticas, cambian ante una transformación de Lorentz de un sistema a otro. Aunque esto no se verá aquí, se recomienda al estudiante que lo estudie en cualquier otra parte con el fin de que tenga una visión más general, particularmente de las relaciones entre los campos eléctrico y magnético. Véase el apéndice L.

Apéndice B

Radiación por una carga acelerada

Aquí se da una visión cualitativa de la teoría clásica de la emisión de radiación electromagnética por una carga acelerada, restringiéndose al caso de una carga estacionaria en el vacío que se la acelera bruscamente hasta una velocidad no relativista $v \ll c$.

Se sabe que una carga estacionaria tiene un campo eléctrico estático **E** asociado, cuya energía por unidad de volumen está dada por

$$\rho = \frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 \tag{B-1}$$

Esta energía está almacenada en el campo y no es radiada. Si la carga se mueve con una velocidad uniforme, existe un campo magnético **B** asociado a ella así como un campo eléctrico. La energía total almacenada en el campo no estático de una carga que se mueve uniformemente, es mayor que la del campo estático de una carga estacionaria, la energía adicional proviene del trabajo hecho por las fuerzas que inicialmente producen el movimiento de la carga. En este caso, la densidad de energía está dada por

$$\rho = \frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \tag{B-2}$$

y la energía almacenada en el campo se mueve con la carga. Que en este caso no se radía energía aun en este caso, se sigue de transformar a un sistema de referencia en el cual la carga está estacionaria y de aplicar el requisito relativista de que el comportamiento de la carga, incluyendo el que radie o no, no puede depender del sistema de referencia desde el que se observa. Por lo tanto,para una carga que tiene velocidad constante, los campos eléctrico y magnético son capaces de ajustarse entre ellos de tal manera que no radie energía, a pesar de que estos campos no sean estáticos.

Sin embargo, para una carga acelerada los campos eléctrico y magnético no estáticos no pueden ajustarse entre si de modo tal, que no se radie nada de la energía almacenada. Esto se puede entender cualitativamente considerando el comportamiento del campo eléctrico. En la figura B-1 se describe este campo mediante el esquema de algunas de las líneas de fuerza que circundan una carga que se encontraba en reposo al instante inicial t y sufre una aceleración constante hacia la derecha durante el intervalo t a t' para continuar mo-

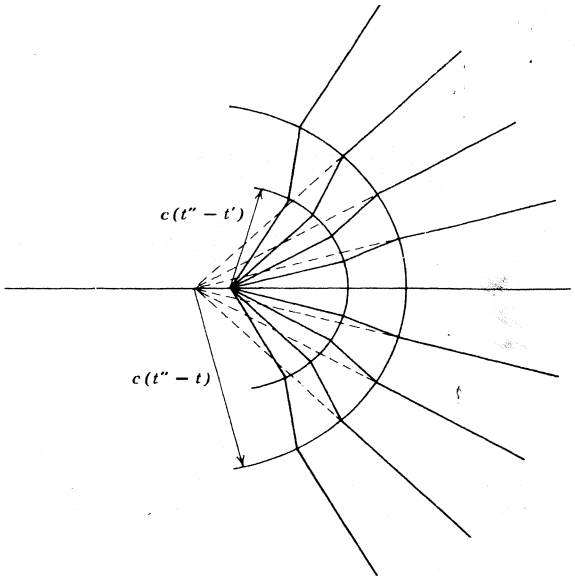


FIGURA B-1

Líneas de fuerza que circundan una carga acelerada. Sólo se muestran algunas de las líneas.

viéndose con velocidad final constante. La figura muestra las líneas de fuerza para algún instante posterior t'' visto desde un sistema de referencia que se mueve a la velocidad v. Para distancias pequeñas las líneas de fuerza están dirigidas radialmente hacia afuera desde la posición real de la carga. Para distancias grandes las líneas nacen desde donde el campo se anticiparía si la carga no estuviera acelerada. La razón es que la información sobre la posición de la carga no puede transmitirse a puntos lejanos con velocidad infinita, sino solamente con velocidad c. Como resultado de esto, aparecen quiebres en la línea de fuerza localizadas entre una esfera centrada en la posición anticipada y de radio $c(t'' - t)$ que es la mínima distancia a la cual el campo puede "saber" que empezó la aceleración, y una esfera centrada en la posición real y de radio $c(t'' - t')$ que es la distancia mínima a la cual el campo puede "saber" que cesó la aceleración. Conforme aumenta t'' la región que contiene los quiebres se expanden hacia afuera con velocidad c. Es decir, cada quiebre de ajuste se propaga a lo largo de su línea de fuerza de la misma manera que se propaga un quiebre generado en el extremo de una cuerda tensa. En la región que contiene los quiebres el campo eléctrico tiene componentes tanto longitudinales como transversales a la dirección de expansión. Pero construyendo diagramas para varios valores de t'' es fácil ver que la componente longitudinal muere muy rápidamente y puede ignorarse de inmediato, mientras que la componente transversal muere lentamente. De hecho, la teoría electromagnética muestra, por cálculos basados en la misma idea de este estudio cualitativo, que a distancias grandes de la región de la aceleración (t'' grandes) el campo eléctrico transverso está sujeto a la ecuación

$$E_{\perp} = \frac{qa}{4\pi\epsilon_0 c^2 r} \operatorname{sen} \theta \tag{B-3}$$

En esta ecuación, que es válida sólo si $v/c \ll 1$, $r = c(t'' - t)$ es la magnitud del vector **r** de la región en la cual la aceleración **a** tiene lugar al punto en el cual se evalúa el campo transverso y θ es el ángulo entre **r** y **a**. La dependencia de $E_\perp$ con θ y **r** se puede ver de la figura B-1 y diagramas comparables para valores grandes de t'' y será claro de este estudio que $E_\perp$ deberá ser proporcional a q y a. Similarmente, existe un campo magnético transverso que se mueve a lo largo de $E_\perp$ si $v/c \ll 1$ para distancias grandes desde la región de la aceleración su intensidad está dada por

$$B_\perp = \frac{\mu_0 qa}{4\pi cr} \operatorname{sen}\theta \tag{B-4}$$

Estos dos campos transversales provenientes de la radiación electromagnética emitida por la carga acelerada se propagan hacia afuera con velocidad c. El campo radiado está polarizado con **E** en el plano de **a** y **r** con **B** en ángulo recto con este plano. La densidad de energía de la radiación es

$$\rho = \frac{1}{2}\epsilon_0 E_\perp^2 + \frac{1}{2}\frac{B_\perp^2}{\mu_0}$$

o con $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$ asi que $B_\perp = E_\perp/c$

$$\rho = \frac{1}{2}\epsilon_0 E_\perp^2 + \frac{1}{2}\epsilon_0 E_\perp^2 = \epsilon_0 E_\perp^2 \tag{B-5}$$

El "vector de Poynting" que da el flujo de energía por unidad de área (es decir, la densidad de radiación) esta dirigido a lo largo de **r** y tiene magnitud

$$S = \rho c = \epsilon_0 c E_\perp^2$$

Por lo tanto, de (B-3)

$$S = \frac{q^2 a^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3 r^2} \operatorname{sen}^2\theta \tag{B-6}$$

que se puede obtener también de la relación que define el vector de Poynting

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0}\mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

Obsérvese que no se emite energía hacia adelante o hacia atrás de la dirección de la aceleración ($\theta = 0°$ o $180°$) y que la energía emitida es un máximo a ángulo recto de esta dirección ($\theta = 90°$ o $270°$). La energía radiada está distribuída simétricamente alrededor de la línea del movimiento acelerado y respecto a las direcciones hacia adelante y hacia atrás. De (B-6) también se ve que la intensidad radiada está sujeta a la ley familiar del inverso del cuadrado $S \propto 1/r^2$. Para obtener la razón R a la cual se radía la energía total en todas direcciones por unidad de tiempo, es decir, la potencia, integramos S sobre el área de una esfera de radio arbitrario r. Esto es

$$R = \int S(\theta)\, dA = \int_0^\pi S(\theta) 2\pi r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta$$

donde $dA = 2\pi r^2 \operatorname{sen}\theta\, d\theta$ es el elemento diferencial anular de área de la esfera en un intervalo entre θ y $\theta + d\theta$. Realizando la integración se obtiene

$$R = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2}{3}\frac{q^2a^2}{c^3} \tag{B-7}$$

que es la razón de radiación de energía por la carga acelerada. Se puede observar que la razón de radiación es proporcional al cuadrado de la aceleración.

Deberá observarse que la energía deberá suministrarse para mantener una aceleración lineal constante de la carga, parte de ella simplemente para compensar la energía radiada. Sin embargo, la energía perdida es usualmente despreciable para velocidades no relativistas. En el caso de desaceleración la energía radiada es suministrada por la energía almacenada en el campo electromagnético de la carga cuya velocidad decrece. Esta es la radiación de bremmstrahlung estudiada en el capítulo 2.

Frecuentemente se aplica (B-7) a un dipolo eléctrico vibrante. Sea q una carga que vibra alrededor del origen del eje x con movimiento armónico simple. Entonces, el desplazamiento de la carga como función del tiempo es $x = A \operatorname{sen} \omega t$ donde A es la amplitud de la vibración y $\omega = 2\pi\nu$ es la frecuencia angular. La aceleración de la carga está dada por $a = d^2x/dt^2 = -\omega^2 A \operatorname{sen} \omega t = -\omega^2 x$. Si se substituye esta expresión por a en (B-7) se obtiene

$$R = \frac{2q^2\omega^4x^2}{4\pi\epsilon_0 3c^3} \tag{B-8}$$

Ya que x varía en el tiempo, la potencia radiada también varía con el tiempo con la misma frecuencia que la vibración del dipolo. Sin embargo, el valor promedio de $x^2 = A^2\operatorname{sen}^2 \omega t$ sobre un periodo de vibración, es simplemente $A^2/2$ así que la razón promedio de radiación está dada por

$$\bar{R} = \frac{q^2\omega^4A^2}{4\pi\epsilon_0 3c^3}$$

o con $\omega = 2\pi\nu$

$$\bar{R} = \frac{16\pi^4\nu^4q^2A^2}{4\pi\epsilon_0 3c^3} \tag{B-9}$$

Ahora, qx es el momento dipolar eléctrico del dipolo vibrante cuando la carga está en x. Así, qA es la amplitud del momento dipolar eléctrico. Escribiendo $qA = p$ se tiene la expresión usual

$$\bar{R} = \frac{4\pi^3\nu^4p^2}{3\epsilon_0c^3} \tag{B-10}$$

Apéndice C

Distribución de Boltzmann

Aquí se presenta un argumento numérico simple que conduce a una aproximación de la distribución de Boltzmann y a continuación un argumento general aun más simple que verifica la forma exacta de la distribución. Considérese un sistema que contiene un gran número de entidades físicas del mismo tipo y que están en equilibrio térmico a temperatura T. Para estar en equilibrio deben ser capaces de intercambiar energía entre ellas. En el intercambio de energías habrá fluctuaciones y, en algunas ocasiones, algunas tendrán más que la energía promedio y otras tendrán menos. Sin embargo, la teoría clásica de la mecánica estadística requiere que estas energías $\mathscr{E}$ se distribuyan según una distribución probabilística definida, cuya forma está especificada por T. Una razón es que el valor promedio $\overline{\mathscr{E}}$ de la energía de cada entidad está determinado por la distribución de probabilidad y $\overline{\mathscr{E}}$ deberá tener un valor definido para una T particular.

Para mostrar estas ideas, considere un sistema que consiste de entidades del mismo tipo y que pueden contener energía. Un ejemplo sería un conjunto de resortes idénticos, cada uno de los cuales contiene energía si su longitud está vibrando. Suponga que el sistema está aislado de lo que lo rodea de modo que la energía total es constante y suponga también que las entidades pueden intercambiar energía entre ellas mediante algún mecanismo, de tal manera que cada uno de los constituyentes del sistema pueden entrar en equilibrio térmico con el resto. Con el objeto de simplificar los cálculos subsecuentes, supóngase también por el momento que la energía de cualquier ente está restringida a uno de los valores $\mathscr{E} = 0, \Delta\mathscr{E}, 2\Delta\mathscr{E}, 3\Delta\mathscr{E}, 4\Delta\mathscr{E}, \ldots$. Posteriormente se hara que el intervalo $\Delta\mathscr{E}$ tienda a cero, de modo que todos los valores de $\mathscr{E}$ sean permitidos. Para mayor simplicidad se considerará primero que solamente existen cuatro (un número elegido pequeño arbitrariamente) entidades en el sistema y que la energía total de éste tiene el valor $3\Delta\mathscr{E}$ (que también se escoge pequeño arbitrariamente dentro de los múltiplos enteros que $\Delta\mathscr{E}$ puede tomar). Posteriormente, se generaliza a sistemas con un número grande de entes y cualquier energía total.

Ya que los cuatro entes pueden intercambiar energía entre sí. todas las divisiones de la energía total $3\Delta\mathscr{E}$ a los cuatro entes son posibles. En la figura C-1 se muestran todas las divisiones posibles que se han marcado con la letra i. Para $i = 1$ tres entes tienen $\mathscr{E} = 0$ y la cuarta tiene $\mathscr{E} = 3\Delta\mathscr{E}$ dando así la energía total requerida $3\Delta\mathscr{E}$. En realidad, existen cuatro formas diferentes de lograr esta división ya que cualquiera de las cuatro puede ser la que está en el

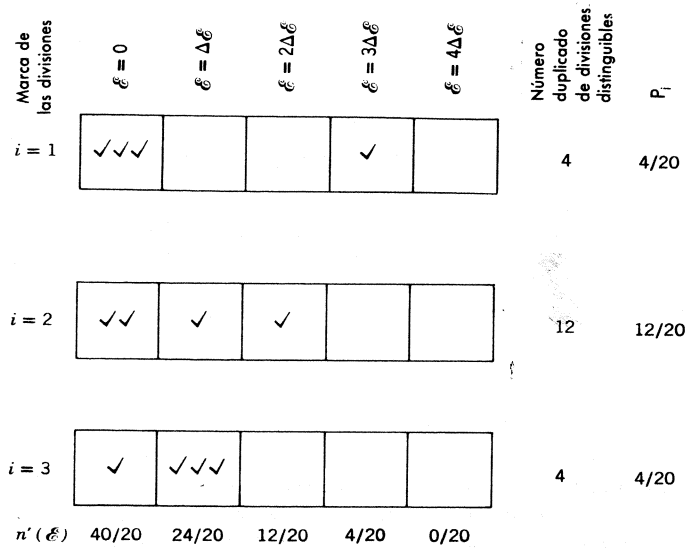


FIGURA C-1
Ilustración de un cálculo simple que conduce a una aproximación a la distribución de Boltzmann.

estado de energía $\mathscr{E} = 3\Delta\mathscr{E}$. En la figura esto se indica en la columna marcada "número de divisiones duplicados distinguibles". Un segundo tipo de división posible, marcando $i = 2$ es una en la cual dos entes tienen $\mathscr{E} = 0$ el tercero $\mathscr{E} = \Delta\mathscr{E}$ y el cuarto $\mathscr{E} = 2\Delta\mathscr{E}$. En este caso existen doce divisiones duplicadas. La tercera división posible, marcada $i = 3$ tiene también cuatro modos duplicados de contar con un ente con $\mathscr{E} = 0$ y los otros tres con $\mathscr{E} = \Delta\mathscr{E}$ dando la energía total requerida $3\Delta\mathscr{E}$.

Al evaluar el número de divisiones duplicadas se cuentan como duplicados distinguibles cualquier arreglo de entes entre diferentes estados de energía. Sin embargo, cualquier rearreglo de entes en el mismo estado de energía no se cuenta como duplicado, ya que entes del mismo tipo y que tengan la misma energía no pueden ser distinguibles experimentalmente uno de otro. Esto es, *entes idénticos se tratan como si fueran distinguibles,* excepto para rearreglos dentro del mismo estado de energía. El número total de rearreglos (permutaciones) de los cuatro entes es $4! \equiv 4 \times 3 \times 2 \times 1$. (El número de formas diferentes de ordenar cuatro objetos es 4!, ya que existen cuatro oportunidades de escoger cual de ellos se toma primero, tres oportunidades para escoger el segundo de los tres restantes, dos para tomar el siguiente y sólo una para el último. El número total de oportunidades es $4 \times 3 \times 2 \times 1 \equiv 4!$. Para n objetos el número de ordenamientos diferentes es $n! \equiv n(n-1)(n-2)\cdots 1$.) . Pero los rearreglos dentro del mismo estado de energía no cuentan. Entonces, por ejemplo, en el caso $i = 2$ el número de divisiones duplicados distinguibles se reduce de 4! a $4!/2! = 12$ ya que existen 2! rearreglos en el estado $\mathscr{E} = 0$ que no cuentan como distinguibles . En los casos $i = 1$ o $i = 3$ el número de esas divisiones se reducen de $4!$ a $4!/3! = 4$ ya que existen 3! rearreglos dentro del estado $\mathscr{E} = 0$ o el estado $\mathscr{E} = \Delta\mathscr{E}$ que no cuentan como distinguibles.

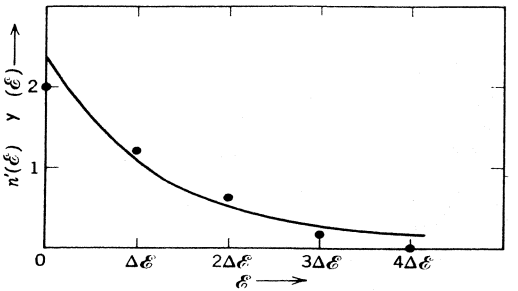


FIGURA C-2
Comparación de los resultados de un cálculo simple y la distribución de Boltzmann.

Ahora se hará la suposición final: *todas las divisiones posibles de la energía del sistema ocurren con la misma probabilidad.* Por lo tanto la probabilidad de que las divisiones de un tipo (o marca) dado ocurran, es proporcional al número de divisiones duplicadas distinguibles de este tipo. La probabilidad relativa, P_i es justamente igual a este número dividido entre el número total de esas divisiones. En la figura C-1 se enlistan las probabilidades relativas en la columna marcada P_i.

A continuación, se calculará $n'(\mathscr{E})$ que es el número probable de entes en el estado de energía $\mathscr{E}$. Considérese el estado de energía $\mathscr{E} = 0$. Para las divisiones del tipo $i = 1$ existen tres entes en este estado y la probabilidad relativa P_i de que ocurran estas divisiones es 4/20; para $i = 2$ existen dos entes en este estado y P_i es 12/20; para $i = 3$ existe un ente, y P_i es 4/20. Entonces $n'(0)$ el número probable de entes en el estado $\mathscr{E} = 0$, es $3 \times (4/20) + 2 \times (12/20) + 1 \times (4/20) = 40/20$. Los valores de $n'(\mathscr{E})$ calculados en la misma forma para los otros valores de $\mathscr{E}$ se enlistan en la parte inferior de la figura C-1 y se denotan por $n'(\mathscr{E})$. (Obsérvese que la suma de estos números es cuatro, por lo tanto, se encuentra un total correcto de cuatro entes en todos los estados). En la figura C-2 también se han graficado como puntos, los valores de $n'(\mathscr{E})$. La curva sólida en la figura C-2 es la función exponencial decreciente

$$n(\mathscr{E}) = Ae^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0} \qquad \text{(C-1)}$$

donde A y $\mathscr{E}_0$ son constantes que se han ajustado por dar el mejor llenado de la curva con los puntos que representan los resultados de estos cálculos. La rápida caída en $n'(\mathscr{E})$ con el incremento de $\mathscr{E}$ refleja el hecho de que, si un ente toma una gran parte de la energía total del sistema el resto del sistema tendrá necesariamente una energía reducida y, por lo tanto, un número considerablemente reducido de modos de dividir esa energía entre sus partes constitutivas. Esto es, existen muy pocas divisiones de la energía total del sistema en situaciones en las que una parte relativamente grande de la energía está concentrada en un ente.

Imagine ahora que se hace $\Delta\mathscr{E}$ más y más pequeña sucesivamente, incrementando el número de estados permitidos al mismo tiempo que se mantiene la energía total en su valor previo. El resultado de este proceso es que la función $n'(\mathscr{E})$ calculada resulta definida para valores de $\mathscr{E}$ que están más y más próximos entre sí. (Esto es, se tendrán más puntos en nuestra distribución). En el límite $\Delta\mathscr{E} \to 0$ la energía de un ente se hace una variable continua, como lo demanda la física clásica y la distribución $n'(\mathscr{E})$ se hace una función continua. Por último, si se permite que el número de entes en el

sistema sea grande, se encuentra que esta función es idéntica con la exponencial decreciente $n(\mathscr{E})$ de (C-1). (Esto es, conforme los puntos se hacen más y más próximos no se apartan de la exponencial decreciente sino que caen justamente en ella). El verificar esto mediante una extensión directa de estos cálculos al caso de un número muy grande de estados de energía y entes, involucra una contabilidad formidable para enumerar las divisiones distinguibles que tienen los valores requeridos de la energía total y el número de entes y a continuación calcular las muchas probabilidades relativas. Se verificará la validez de la distribución de la probabilidad dada en (C-1) mediante un procedimiento más sutil pero muy simple.

Considere un sistema de muchos entes idénticos en equilibrio térmico entre ellos, encerrado en paredes que lo aislan de sus alrededores. El equilibrio requiere que los entes sean capaces de intercambiar energía. Por ejemplo, al interactuar con las paredes del sistema, los entes pueden intercambiar energía con las paredes y así indirectamente intercambiar energía con cada una de las otras. Entonces, si al interactuar con los otros entes, uno gana energía, lo hace a expensas de la energía del resto del sistema (todos los otros entes más las paredes). Excepto por esta constricción de la conservación de la energía los entes son independientes entre sí. *La presencia de un ente en algún estado de energía en particular no inhibe o favorece en ninguna forma la oportunidad de que otro ente idéntico esté en ese estado.* Considere ahora dos de estos entes. Sea $P(\mathscr{E}_1)$ la probabilidad de encontrar a uno de ellos en un estado de energía $\mathscr{E}_1$. Entonces la probabilidad de encontrar al otro en un estado de energía $\mathscr{E}_2$ estará dada por la misma función de distribución de probabilidad, ya que los entes tienen propiedades idénticas, pero evaluadas a la energía $\mathscr{E}_2$ la probabilidad será $P(\mathscr{E}_2)$. Debido al comportamiento independiente de los entes, estas dos probabilidades son independientes entre sí. Como consecuencia, la probabilidad de que la energía de un ente sea $\mathscr{E}_1$ y que la energía del otro sea $\mathscr{E}_2$ está dada por $P(\mathscr{E}_1)P(\mathscr{E}_2)$. La razón es que las probabilidades independientes son multiplicativas. (Si la probabilidad de obtener cara en un "volado" es 1/2, entonces la probabilidad de obtener cara en cada uno de dos "volados" es $(1/2) \times (1/2) = 1/4$ ya que los "volados" son independientes).

A continuación, se considerarán todas las divisiones de la energía del sistema en el cual la suma de las energías de los dos entes tiene el mismo valor fijo $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2$ que en el caso particular recién estudiado, pero en el cual los dos entes toman porciones diferentes de esta energía ya que la energía total del sistema aislado es constante, para todas estas divisiones el resto del sistema también tendrá un valor fijo de energía. Así para todas ellas existe el mismo número posible de modos para el resto del sistema para distribuir su energía entre sus componentes. Como consecuencia, la probabilidad de estas divisiones en las cuales existe cierta porción de la energía $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2$ entre los dos entes, puede diferir de la probabilidad de las otras divisiones, en las cuales existe una porción diferente de dicha energía sólo si estas porciones distintas ocurren con probabilidades diferentes. Si nuevamente se supone que *todas las divisiones posibles de la energía del sistema ocurren con la misma probabilidad,* se ve que esto no puede ser y se concluye que todas las divisiones en las que la misma energía $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2$ se distribuye entre los dos entes en formas diferentes ocurren con la misma probabilidad. En otras palabras, la probabilidad de todas estas divisiones es solamente función de $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2$ y, por lo tanto, se puede escribir como, por ejemplo $Q(\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2)$. Sin embargo, anteriormente se concluyó que la probabilidad para un caso particular también se puede escribir como $P(\mathscr{E}_1) \cdot P(\mathscr{E}_2)$. Entonces se encuentra que $P(\mathscr{E}_1) \cdot P(\mathscr{E}_2) = Q(\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2)$.

El punto esencial aquí es que la función de distribución de probabilidad $P(\mathscr{E})$ tiene la propiedad de que el producto de dos de estas funciones, evaluado para dos valores diferentes de las variables $\mathscr{E}_1$ y $\mathscr{E}_2$ es una función de la suma $\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2$ de estas variables. Pero una función exponencial y sólo una función exponencial, tiene esta propiedad ya que el producto de dos exponenciales con diferentes exponentes es una exponencial cuyo exponente es la suma de los dos exponentes. Específicamente, si se toma que la probabilidad $P(\mathscr{E})$ de encontrar a un ente en un estado con energía $\mathscr{E}$ sea proporcional al número probable $n(\mathscr{E})$ de entes en ese estado, como deberá de ser ciertamente y se usa (C-1) para evaluar $n(\mathscr{E})$ se tiene la función

$$P(\mathscr{E}) = Be^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0} \tag{C-2}$$

donde B es proporcional a A, lo que demuestra la propiedad requerida ya que

$$P(\mathscr{E}_1)P(\mathscr{E}_2) = Be^{-\mathscr{E}_1/\mathscr{E}_0}Be^{-\mathscr{E}_2/\mathscr{E}_0} = B^2e^{-(\mathscr{E}_1+\mathscr{E}_2)/\mathscr{E}_0} = Q(\mathscr{E}_1 + \mathscr{E}_2)$$

Realmente este argumento no prueba que $n(\mathscr{E})$ es una exponencial decreciente, en vez de una creciente, pero una exponencial creciente se puede desechar sobre bases físicas cuando su valor va a infinito para valores grandes de $\mathscr{E}$. Entonces, se ha verificado la validez general de (C-1). Ahora se evaluará la constante $\mathscr{E}_0$ que aparece en (C-1).

$$n(\mathscr{E}) = Ae^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0}$$

Al tratar un sistema con dos tipos distintos de entes en equilibrio térmico, no es difícil probar que el valor de $\mathscr{E}_0$ no depende del tipo de entes que componen el sistema. Entonces en este argumento se usarán entes con las propiedades más simples. Puesto que $n(\mathscr{E})$ es el número probable de entes del sistema en un estado de energía $\mathscr{E}$ el número de entes cuyas energías deberían encontrarse en el intervalo entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ es igual a $n(\mathscr{E})$ veces el número de estados en ese intervalo. Si este número es independiente del valor de $\mathscr{E}$ (es decir, si los estados están uniformemente distribuidos en energía), entonces el número será proporcional al tamaño de $d\mathscr{E}$ del intervalo. Este es el caso si los entes son osciladores armónicos simples, como los resortes mencionados con anterioridad. Así, el número probable de osciladores armónicos simples con energía entre $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ en un sistema en equilibrio que contenga muchos de ellos, es proporcional a $n(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$. Si a la constante multiplicativa A se le da el valor adecuado, se puede hacer esta probabilidad igual a $n(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$. Entonces, la energía promedio de uno de los osciladores es

$$\bar{\mathscr{E}} = \frac{\displaystyle\int_0^\infty \mathscr{E}n(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}}{\displaystyle\int_0^\infty n(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}}$$

La integral en el numerador tiene un integrando que es la energía pesada por el número de osciladores que tienen esa energía; la integral en el denominador es justamente el número total de osciladores. Si se evalúa $n(\mathscr{E})$ de (C-1), se tiene

$$\bar{\mathscr{E}} = \frac{\int_0^\infty A\mathscr{E}e^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0}\,d\mathscr{E}}{\int_0^\infty Ae^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0}\,d\mathscr{E}}$$

(Obsérvese que no se necesita conocer el valor de A). Procediendo de una manera completamente análoga a la utilizada en el ejemplo 1-4, excepto que en vez de sumas aparecen integrales, se encuentra

$$\bar{\mathscr{E}} = \mathscr{E}_0 \tag{C-3}$$

Pero según la ley clásica de la equipartición de la energía expresada en (1-16), para osciladores armónicos simples en equilibrio a temperatura T

$$\bar{\mathscr{E}} = kT \tag{C-4}$$

donde k es la *constante de Boltzmann* $k = 1.38 \times 10^{-23}$ joule/°K. Combinando (C-3) y (C-4) se tiene

$$\mathscr{E}_0 = kT \tag{C-5}$$

Este resultado es correcto para entes de cualquier tipo, no obstante que se obtuvo para el caso particular de osciladores armónicos simples. Por lo tanto se puede escribir (C-1) como

$$n(\mathscr{E}) = Ae^{-\mathscr{E}/kT} \tag{C-6}$$

Esta es la famosa *distribución de Boltzmann*. Ya que el valor de A no se especifica, (C-6) describe en realidad una proporcionalidad: el número probable de entes de un sistema en equilibrio a temperatura T en un estado de energía es proporcional a $e^{-\mathscr{E}/kT}$. Expresado en otros términos: la probabilidad de que un estado de energía $\mathscr{E}$ esté ocupado por un ente es proporcional a $e^{-\mathscr{E}/kT}$.

El valor que se escoge para la constante A está determinado por la conveniencia. En el capítulo 1 se aplicó la distribución de Boltzmann a un sistema tal $n(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ es proporcional al número probable de osciladores con energía en el intervalo $\mathscr{E}$ a $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ ya que los estados de un oscilador armónico simple están distribuidos uniformemente en energía. Por supuesto, $n(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ también es proporcional a la probabilidad $P(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ de encontrar un oscilador particular en energía en este intervalo. Entonces se tiene, como en (C-2)

$$P(\mathscr{E}) = Be^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0}$$

Siempre que la constante B se escoja apropiadamente, lo que se consigue haciendo

$$\int_0^\infty P(\mathscr{E})\,d\mathscr{E} = \int_0^\infty Be^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0}\,d\mathscr{E} = B\int_0^\infty e^{-\mathscr{E}/\mathscr{E}_0}\,d\mathscr{E} = 1 \tag{C-7}$$

Esto es, se definió $P(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ como la probabilidad de encontrar un oscilador armónico simple particular con energía ente $\mathscr{E}$ y $\mathscr{E} + d\mathscr{E}$ y así por consistencia, se habrá de requerir que $\int_0^\infty P(\mathscr{E})\,d\mathscr{E}$ tenga el valor uno ya que la in-

tegral es justamente la probabilidad de encontrarlo con alguna energía. Evaluando $\int_0^\infty e^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0} d\mathcal{E}$ en (C-7) y resolviendo para B se encuentra $B = 1/kT$. Entonces, se tiene una forma especial para la distribución de Boltzmann

$$P(\mathcal{E}) = \frac{e^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0}}{kT} \tag{C-8}$$

que es la que se utilizó en el capítulo 1.

Apéndice D

Trayectorias en la dispersión de Rutherford

La figura 4-4 muestra los parámetros para la trayectoria en la dispersión de una partícula ligera de carga positiva $+ze$ por un núcleo pesado de carga positiva $+Ze$. En el texto se vió que el impulso angular $L = Mr^2\, d\varphi/dt$ es constante ya que la fuerza sobre la partícula siempre está actuando en la dirección radial. Aplicando la ley de Newton a la componente radial del movimiento, para determinar la trayectoria de la partícula, y de $\mathbf{F} = M\mathbf{a}$ se obtiene

$$\frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = M\left[\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2\right] \tag{D-1}$$

donde el término del primer miembro es la fuerza de Coulomb y los del segundo miembro son d^2r/dt^2 la aceleración radial debida al cambio en la magnitud de $\mathbf{r}$ y $-r(d\varphi/dt)^2 = -\omega^2 r$ es la aceleración centrípeta (que también está dirigida radialmente) debido al cambio en la dirección de $\mathbf{r}$. Para obtener la trayectoria se necesita encontrar $\mathbf{r}$ como función de φ.

Esto simplifica la solución de (D-1) para escribirla no en términos de las coordenadas r, φ, sino en términos de las coordenadas u, φ, donde

$$r = 1/u \tag{D-2}$$

Entonces,

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{dr}{du}\frac{du}{d\varphi}\frac{d\varphi}{dt}$$

o

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{1}{u^2}\frac{du}{d\varphi}\frac{Lu^2}{M} = -\frac{L}{M}\frac{du}{d\varphi}$$

y

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{d}{d\varphi}\left(\frac{dr}{dt}\right)\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{L}{M}\frac{d^2u}{d\varphi^2}\frac{Lu^2}{M}$$

o

$$\frac{d^2r}{dt^2} = -\frac{L^2u^2}{M^2}\frac{d^2u}{d^2\varphi}$$

Substituyendo esto en (D-1), se tiene

$$-\frac{L^2u^2}{M^2}\frac{d^2u}{d\varphi^2}-\frac{1}{u}\left(\frac{Lu^2}{M}\right)^2=\frac{zZe^2u^2}{4\pi\epsilon_0 M}$$

o

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2}+u=-\frac{zZe^2M}{4\pi\epsilon_0L^2}=-\frac{zZe^2M}{4\pi\epsilon_0M^2v^2b^2} \tag{D-3}$$

ya que $L = Mvb$, donde v es la velocidad inicial de la partícula y b es su parámetro de impacto definido en la figura 4-4. Si se hace $D=(zZe^2/4\pi\epsilon_0)/(Mv^2/2)$ como en (4-4) se simplifica a

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2}+u=-\frac{D}{2b^2} \tag{D-4}$$

Esta es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden para u como función φ.
La *solución general* para (D-4) es

$$u = A\cos\varphi + B\operatorname{sen}\varphi - D/2b^2 \tag{D-5}$$

que contiene dos constantes arbitrarias A y B. Se puede probar que efectivamente (D-5) es solución de (D-4) evaluando

$$\frac{du}{d\varphi} = -A\operatorname{sen}\varphi + B\cos\varphi$$

y

$$\frac{d^2u}{d\varphi^2} = -A\cos\varphi - B\operatorname{sen}\varphi$$

y substituyendo esto en (D-4). Esta da

$$-A\cos\varphi - B\operatorname{sen}\varphi + A\cos\varphi + B\operatorname{sen}\varphi - \frac{D}{2b^2} \equiv -D/2b^2$$

Esta identidad prueba la validez de la solución general.
Para obtener la *solución particular* habrán de evaluarse las constantes A y B. Se requiere que (D-5) satisfaga las *condiciones iniciales:* $\varphi \to 0$ cuando $r \to \infty$ y $dr/dt \to -v$ cuando $r \to \infty$. Entonces,

$$u = \frac{1}{r} = 0 = A\cos 0 + B\operatorname{sen} 0 - \frac{D}{2b^2}$$

o

$$A = \frac{D}{2b^2}$$

y

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{L}{M}\frac{du}{d\varphi} = -v = -\frac{L}{M}(-A\operatorname{sen}0 + B\cos 0)$$

o

$$B = \frac{Mv}{L} = \frac{Mv}{Mvb} = \frac{1}{b}$$

Por lo tanto, la solución particular es

$$u = \frac{D}{2b^2}\cos\varphi + \frac{1}{b}\operatorname{sen}\varphi - \frac{D}{2b^2}$$

o

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b}\operatorname{sen}\varphi + \frac{D}{2b^2}(\cos\varphi - 1) \qquad \text{(D-6)}$$

Esta es la ecuación de la órbita que da a r como función de φ. Se ve que la trayectoria es hiperbólica, ya que (D-6) es la ecuación de una hipérbole en coordenadas polares.

Apéndice E

Cantidades complejas

El *número imaginario* i es una unidad definida, de modo que

$$i^2 = -1 \qquad \text{o} \qquad i = \sqrt{-1} \tag{E-1}$$

El nombre es apropiado porque ninguno de los números reales (es decir, ordinarios) tienen cuadrados negativos. En forma general un *número complejo* z se puede escribir

$$z = x + iy \tag{E-2}$$

donde ambos x y y son números reales. Al número x se le llama la *parte real de* z, y al número y se le llama la *parte imaginaria* de z (aunque y es real). Nótese que z se reduce a un número real puro si $y = 0$, y se reduce a un número imaginario puro si $x = 0$.

Los números complejos están sujetos a las leyes del álgebra que se aplican a los números reales, excepto por la propiedad especificada en la definición (E-1). También la definición de igualdad se extiende a los números complejos, entonces, dos números complejos son iguales sí y sólo si la parte real de uno es igual a la parte real del otro, y la parte imaginaria de uno es igual a la parte imaginaria del otro.

Entonces,

$$z_1 = z_2 \tag{E-3a}$$

implica

$$x_1 = x_2 \qquad y_1 = y_2 \tag{E-3b}$$

y viceversa.

El *complejo conjugado* del número $z = x + iy$ se denota por z^*, y se define como

$$z^* = x - iy \tag{E-4}$$

De la definición se deduce que

$$z^*z = (x - iy)(x + iy) = x^2 - i^2y^2 - ixy + ixy = x^2 - i^2y^2$$

siendo

$$z^*z = x^2 + y^2 \tag{E-5}$$

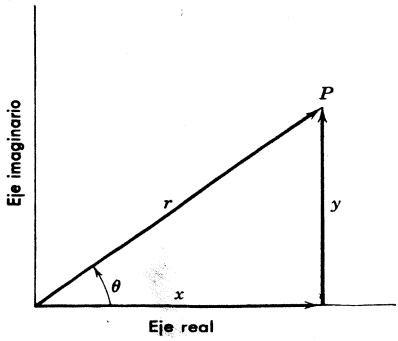


FIGURA E-1
Representación geométrica de un número complejo. Las relaciones entre las coordenadas rectangulares y polares del punto representativo P se pueden determinar inspeccionando la figura.

Entonces, el producto de un número complejo por su complejo conjugado siempre es igual a un número real. La ecuación (E-5) sugiere el teorema Pitagórico. De hecho, hay una representación de números complejos muy útil en la figura E-1. La ubicación de un punto P, relativo a los que se llaman los *ejes real* e *imaginario* del *plano complejo*, está dada en la manera definida en la figura para especificar la parte real x y la parte imaginaria y del número complejo asociado. La localización del *punto P representativo* se puede especificar por las coordenadas polares r y θ, llamados *módulo* y *fase* que están definidos en la figura. Los dos conjuntos de coordenadas están relacionados por

$$x = r\cos\theta$$

$$y = r\,\text{sen}\,\theta \tag{E-6}$$

y

$$r^2 = x^2 + y^2$$

$$\cos\theta = \frac{x}{r} \qquad \text{sen}\,\theta = \frac{y}{r} \tag{E-7}$$

De (E-2) y (E-6), se observa que un número complejo en general se puede expresar en coordenadas polares como

$$z = r(\cos\theta + i\,\text{sen}\,\theta) \tag{E-8}$$

Nótese también que

$$z^*z = r^2 \tag{E-9}$$

Considerando las rotaciones en el plano complejo del punto representativo P pueden revelarse importantes relaciones. En la figura E-2, z es un número complejo representado por un punto P en el eje real. Si a r constante se gira al punto representativo por un ángulo $d\theta$, el número complejo correspondiente cambia a $z + dz$. Se aprecia en la figura que

$$dz = iz\,d\theta$$

o

$$\frac{dz}{z} = i\,d\theta$$

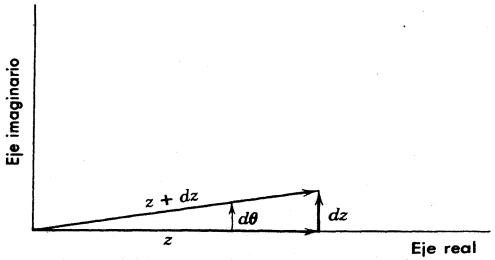


FIGURA E-2
Ilustración de una rotación, a distancia constante desde el origen, de un punto representativo.

Como puede verse, esta relación es independiente de la posición inicial del punto representativo y por lo tanto es integrable.

$$\int_{z\ \text{inicial}}^{z_{\text{final}}} \frac{dz}{z} = i \int_{0}^{\Theta} d\theta$$

Que resulta en

$$\ln \frac{z_{\text{final}}}{z_{\text{inicial}}} = i\Theta$$

o

$$z_{\text{final}} = z_{\text{inicial}}\, e^{i\Theta}$$

Si se toma $r = 1$, entonces z inicial $= 1$ y de la figura (E-8) también se tiene z final $= \cos\Theta + i \operatorname{sen}\Theta$.
De este modo, se obtiene una evaluación del *exponencial complejo*

$$e^{i\Theta} = \cos\Theta + i \operatorname{sen}\Theta \tag{E-10}$$

La rotación en el sentido negativo resulta

$$e^{-i\Theta} = \cos(-\Theta) + i \operatorname{sen}(-\Theta)$$

que es

$$e^{-i\Theta} = \cos\Theta - i \operatorname{sen}\Theta \tag{E-11}$$

Por adición y sustracción de (E-10) y (E-11), se deduce inmediatamente que

$$\cos\Theta = \frac{e^{i\Theta} + e^{-i\Theta}}{2} \tag{E-12}$$

y

$$\operatorname{sen}\Theta = \frac{e^{i\Theta} - e^{-i\Theta}}{2i} \tag{E-13}$$

La comparación de la definición de (E-4) con (E-10) y (E-11) muestran que el complejo conjugado de una exponencial compleja se obtiene cambiando el signo de i que aparece en el exponente. Eso es

$$(e^{i\Theta})^* = e^{-i\Theta} \tag{E-14}$$

Aplicando (E-9) y (E-14) a una exponencial compleja, se encuentra

$$r^2 = z^* z = (e^{i\Theta})^* e^{i\Theta} = e^{-i\Theta} e^{i\Theta} = e^0 = 1$$

Por lo tanto, un exponencial complejo mantiene constante al módulo $r = 1$, aunque su fase está cambiando. Pero su parte real e imaginaria, que son de (E-2) y (E-6) iguales a coseno y seno, son funciones oscilatorias de la fase Θ. Si su fase está aumentando continuamente de 0 a $\pi/2$ o π a $3\pi/2$ y así sucesivamente, una exponencial compleja cambia en valor de $+1$ a $+i$ a -1 a $-i$ a $+1$ y se repite cíclicamente. En este sentido es una función oscilatoria de su fase.

Al diferenciar e integrar una cantidad compleja, se usan los procedimientos usuales del cálculo tratando a i como cualquier otra constante. Un ejemplo de integración se encuentra en el cálculo que condujo a (E-10). Como otro ejemplo, la primera derivada de la exponencial compleja es

$$\frac{de^{i\Theta}}{d\Theta} = ie^{i\Theta} \tag{E-15}$$

Aunque la interpretación geométrica conduce naturalmente a representar la fase de una exponencial compleja como un ángulo Θ, puede utilizarse cualquier cantidad que, como un ángulo, sea adimensional. Los exponenciales complejos más utilizados en mecánica cuántica son:

$$e^{ikx} \qquad e^{i(kx-\omega t)} \qquad e^{-iEt/\hbar}$$

En el primero de ellos, por ejemplo el número de onda k tiene las dimensiones de (longitud)$^{-1}$, entonces k multiplicado por la longitud x es adimensional. Todas las relaciones anotadas para $e^{i\Theta}$ tienen extensión obvia a e^{ikx}. Por ejemplo, la aplicación de las reglas de diferenciación a e^{ikx}, con k constante, produce

$$\frac{de^{ikx}}{dx} = ike^{ikx} \tag{E-16}$$

Apéndice F

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de pozo cuadrado

En la mecánica cuántica como en otros campos de la ciencia y la ingeniería, muchos de los cálculos que surgen en el trabajo profesional ordinario se llevan a cabo con computadoras y utilizando técnicas numéricas. En algunos casos, la función energía potencial que nos interesa es de tal naturaleza que su ecuación de Schrödinger independiente del tiempo no se puede resolver ni aun con las técnicas analíticas más generales. (Por las razones explicadas en el apéndice H). En otros casos es posible obtener soluciones analíticas, pero resulta más conveniente obtener soluciones numéricas si se dispone de una computadora adecuada. Como una ilustración simple de las técnicas numéricas y de los "cálculos imaginarios" de la sección 5-7, se obtendrá aquí una solución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la función energía potencial

$$V(x) = \begin{cases} V_0, \text{ const} & x < -a/2 \quad \text{o} \quad x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \tag{F-1}$$

A esto se le llama un *pozo de potencial cuadrado,* por las razones que son evidentes de la gráfica mostrada en la figura F-1. Para este potencial simple, se puede encontrar una solución numérica muy rápidamente utilizando tan sólo una calculadora pequeña, siempre que no se requiera demasiada precisión, Para este potencial en particular también es posible resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo mediante técnicas analíticas sencillas (véase apéndice G) de modo que se podrá comparar los resultados de la solución exacta con los resultados aproximados que se obtuvieron en la solución numérica.

De los argumentos de la seción 5-7 se sabe que el comportamiento de una solución $\psi(x)$ de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45).

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$

para el potencial $V(x)$ y energía total E quedará determinada completamente para toda x mediante la ecuación y suponiendo valores iniciales para $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$. Para ver esto explícitamente, observe que se puede calcular los

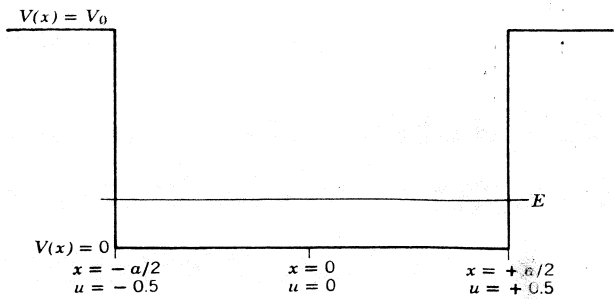


FIGURA F-1
Un pozo de potencial cuadrado y un supuesto valor de la energía total E para una partícula ligada en este potencial.

valores de la solución y su primera derivada en un punto x_1, próximo al punto inicial x_0, en términos de los valores de estas cantidades en el punto inicial, de la manera siguiente . Para $(x_1 - x_0)$ muy pequeño, el valor de la solución en x_1, que se denotará por $[\psi(x)]_{x_1}$, está dado según la definición de la derivada por

$$[\psi(x)]_{x_1} - [\psi(x)]_{x_0} \simeq \left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]_{x_0} (x_1 - x_0) \qquad \text{(F-2)}$$

donde $[\psi(x)]_{x_0}$ es el valor supuesto para la solución en x_0, y $[d\psi(x)/dx]_{x_0}$ es el valor supuesto para su primera derivada en dicho punto. A partir de la ecuación de Schröedinger independiente del tiempo es posible obtener una fórmula similar para $[d\psi(x)/dx]_{x_1}$ en términos de cantidades conocidas, si se escribe

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right] = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$

y después se multiplican ambos miembros por la diferencial dx para obtener

$$d\left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right] = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)\,dx$$

Según la definición de diferencial, esto es

$$\left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]_{x_1} - \left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]_{x_0} \simeq \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]_{x_0}[\psi(x)]_{x_0}(x_1 - x_0) \qquad \text{(F-3)}$$

donde $(x_1 - x_0)$ es muy pequeño. Repitiendo el procedimiento para el nuevo punto de partida x_1, se puede encontrar los valores de $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en un punto más cercano x_2. Continuando de esta manera, se puede construir la solución y su derivada para todos los valores de x.

Para aplicar (F-2) y (F-3) a la función potencial de (F-1) resulta conveniente dividir todo entre el ancho a del pozo potencial. De esta manera las ecuaciones se pueden reescribir en términos de la variable espacial adimensional

$$u = \frac{x}{a} \qquad \text{(F-4)}$$

quedando la ecuación (F-2)

$$[\psi(u)]_{u_1} = [\psi(u)]_{u_0} + \left[\frac{d\psi(u)}{du}\right]_{u_0}(u_1 - u_0) \tag{F-5}$$

y (F-3)

$$\left[\frac{d\psi(u)}{du}\right]_{u_1} = \left[\frac{d\psi(u)}{du}\right]_{u_0} + \frac{2ma^2}{\hbar^2}[V(u) - E]_{u_0}[\psi(u)]_{u_0}(u_1 - u_0) \tag{F-6}$$

Por supuesto que para que se pueda obtener una solución numérica a la ecuación diferencial, se deberá especificar la profundidad V_0 del pozo de potencial. La forma de (F-6) sugiere que es más conveniente el hacerlo especificando el valor de la combinación adimensional de los parámetros $2ma^2V_0/\hbar^2$. Para propósitos de cálculo ilustrativo, se puede escoger cualquier valor razonable. Así, se toma arbitrariamente

$$\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} = 64 \tag{F-7}$$

Si también se expresa la energía total como

$$E = \alpha V_0 \tag{F-8}$$

donde α es un parámetro adimensional, entonces (F-6) toma la forma adimensional

$$\left[\frac{d\psi(u)}{du}\right]_{u_1} = \left[\frac{d\psi(u)}{du}\right]_{u_0} + [C(u)]_{u_0}[\psi(u)]_{u_0}(u_1 - u_0) \tag{F-9}$$

donde

$$C(u) = \begin{cases} -\dfrac{2ma^2E}{\hbar^2} = -\dfrac{2ma^2\alpha V_0}{\hbar^2} = -64\alpha & -0.5 < u < +0.5 \\ \dfrac{2ma^2}{\hbar^2}[V_0 - E] = \dfrac{2ma^2V_0}{\hbar^2}[1 - \alpha] = 64[1 - \alpha] & \\ u < -0.5 \text{ o } u > +0.5 & \end{cases} \tag{F-10}$$

Se realizarán los cálculos numéricos en (F-5) y (F-9) que se han efectuado sin dimensiones puesto que sólo involucran números puros. Los cálculos serán con el propósito de determinar aproximadamente la energía E más baja permitida y la forma de la correspondiente eigenfunción ψ, para una partícula de masa m inmersa en el pozo de potencial cuadrado especificado por (F-2) y (F-7).

De los argumentos cualitativos de la sección 5-7 se sabe que en la región interna del pozo cuadrado la eigenfunción de menor energía aparecerá como la mitad de una onda coseno dentro de la región. Sin embargo, tendrá una longitud de onda mayor, ya que se extiende un poco hacia las regiones exteriores. Para calcular el impulso p correspondiente a la mitad de la longitud de onda $\lambda/2 = a$ que está en la región interna, se puede utilizar la relación de Broglie $p = h/\lambda = h/2a$, y la correspondiente energía $E = p^2/2m = h^2/8ma^2 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ con objeto de ayudar a estimar el valor de E y ahorrar una cantidad considerable de esfuerzo en los cálculos numéricos. El valor estimado de E, en términos de α, es $\alpha = E/V_0 = (\pi^2\hbar^2/2ma^2)/(32\hbar^2/ma^2) = \pi^2/64 = 0.154$. Puesto que λ está subestimada, E y α están sobreestimadas. Por lo tanto se hace una

TABLA F-1. Una integración numérica.

$\alpha = 0.100$ $\quad 1 - \alpha = 0.900$

$C = \begin{matrix} -6.40 \\ +57.6 \end{matrix}$ $\quad \begin{matrix} 0 \leq u < 0.500 \\ u \geq 0.500 \end{matrix}$

u	ψ	$d\psi/du$	$(d\psi/du)\,\Delta u$	$C\psi\Delta u$
0.000	+1.000	0.000	0.000	−0.320
0.050	+1.000	−0.320	−0.016	−0.320
0.100	+0.984	−0.640	−0.032	−0.315
0.150	+0.952	−0.955	−0.048	−0.305
0.200	+0.904	−1.260	−0.063	−0.289
0.250	+0.841	−1.549	−0.077	−0.269
0.300	+0.764	−1.818	−0.091	−0.244
0.350	+0.673	−2.062	−0.103	−0.215
0.400	+0.570	−2.277	−0.114	−0.182
0.450	+0.456	−2.459	−0.123	−0.146
0.500	+0.333	−2.605	−0.130	+0.959
0.550	+0.203	−1.646	−0.082	+0.585
0.600	+0.121	−1.061	−0.053	+0.348
0.650	+0.068	−0.713	−0.036	+0.196
0.700	+0.032	−0.517	−0.026	+0.092
0.750	+0.006	−0.425	−0.021	+0.017
0.800	−0.015	−0.408	−0.020	−0.043
0.850	−0.035	−0.451	−0.023	−0.101
0.900	−0.058	−0.552	−0.028	−0.167
0.950	−0.086	−0.719	−0.036	−0.248
1.000	−0.122	−0.967		

suposición fundamentada y se intenta en el cálculo numérico inicial, el valor de $\alpha = 0.100$. Considerando lo que se ha aprendido de los argumentos cualitativos resulta evidente que la eigenfunción para la energía más baja permitida en este potencial deberá ser simétrica alrededor del punto $u = 0$, con relación al cual el potencial mismo es simétrico. Esto simplifica mucho las cosas ya que solamente se necesita hacer cálculos para la región $u \geq 0$, y por la simetría se llega de inmediato a la conclusión de que $d\psi(u)/du = 0$ para $u = 0$ por lo tanto, se empezará por calcular para $u = 0$. Puesto que la selección de $\psi(u)$ para $u = 0$ es intranscendente debido a la linealidad de la ecuación diferencial, se tomará $\psi(u) = +1.000$ en este punto. Si se toma $u_1 - u_0 = 0.050$, se obtendrá suficiente precisión y así sucesivamente. En la tabla F-1 se muestra el primer cálculo.

El primer renglón de la tabla especifica los valores supuestos de $\psi(u)$ y $d\psi(u)/du$ para $u = 0$, y proporciona parte de la primera etapa del cálculo. Todos los integrantes de este renglón son cantidades evaluadas para $u = 0.000$. El primero es el valor de ψ; el segundo el valor de $d\psi/du$; el tercero es $d\psi/du$ multiplicado por $\Delta u = 0.050$, que es el cambio en u del primero al segundo renglón; y el cuarto ψ se multiplica $C\Delta u$. Para todos los renglones a partir del denotado por $u = 0.450$, $C\Delta u = -6.40 \times 0.050 = -0.320$; más allá de este punto $C\Delta u = +5776 \times 0.050 = +2.88$. El segundo renglón completa la primera etapa del cálculo y constituye parte de la siguiente. De acuerdo con (F-5) y (F-9), la primera cifra del segundo renglón anterior; la segunda cifra es la suma de la segunda y cuarta cifras del renglón anterior. Para construir el resto de la tabla se sigue el mismo esquema. Los cálculos se terminarán en $u = 1.000$ ya que rápidamente se fue a $-\infty$, tal como se

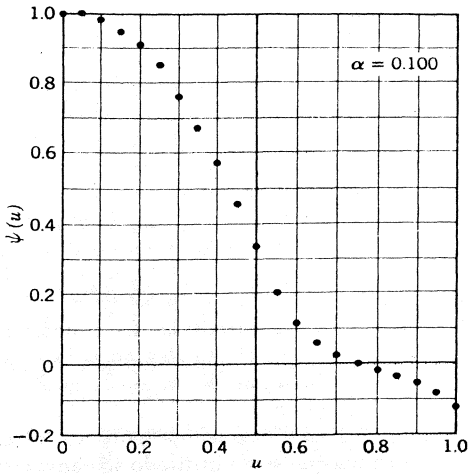


FIGURA F-2
Una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un pozo de potencial cuadrado. La solución empieza a irse a menos infinito para u grandes debido a que el valor supuesto para la energía total es ligeramente grande.

puede ver en la gráfica de la figura F-2. Esto ocurrió porque el valor escogido para α fue muy grande. En consecuencia, se dobla muy rápidamente en la región interior y, por lo tanto, se va a cero en cuanto se está fuera de esta región. Una vez que se va a cero, nada puede evitar que se vaya a $-\infty$.

TABLA F-2. Una segunda integración numérica.

$\alpha = 0.098$ $\quad 1 - \alpha = 0.902$

$C = \begin{matrix} -6.27 \\ +57.7 \end{matrix}$ $\quad \begin{matrix} 0 \le u < 0.500 \\ u \ge 0.500 \end{matrix}$

u	ψ	$d\psi/du$	$(d\psi/du)\,\Delta u$	$C\psi\Delta u$
0.000	+1.000	0.000	0.000	−0.314
0.050	+1.000	−0.314	−0.016	−0.314
0.100	+0.984	−0.628	−0.031	−0.309
0.150	+0.953	−0.937	−0.047	−0.299
0.200	+0.906	−1.236	−0.062	−0.284
0.250	+0.844	−1.520	−0.076	−0.265
0.300	+0.768	−1.785	−0.089	−0.241
0.350	+0.679	−2.026	−0.101	−0.213
0.400	+0.578	−2.239	−0.112	−0.181
0.450	+0.466	−2.420	−0.121	−0.146
0.500	+0.345	−2.566	−0.128	+0.996
0.550	+0.217	−1.570	−0.079	+0.626
0.600	+0.138	−0.944	−0.047	+0.398
0.650	+0.091	−0.546	−0.027	+0.263
0.700	+0.064	−0.283	−0.014	+0.185
0.750	+0.050	−0.098	−0.005	+0.144
0.800	+0.045	+0.046	+0.002	+0.130
0.850	+0.047	+0.176	+0.009	+0.136
0.900	+0.056	+0.312	+0.016	+0.162
0.950	+0.072	+0.474	+0.024	+0.208
1.000	+0.096	+0.682		

En la tabla F-2 se muestra un segundo cálculo, utilizando $\alpha = 0.098$, y su gráfica se muestra en la figura F-3. Este también falla, pero en el sentido opuesto, ya que ψ se dobla alejándose del eje en la región exterior y tiende a irse a $+\infty$. Sin embargo, los resultados de los dos cálculos indican que el valor permitido de α está entre 0.100 y 0.098 y una comparación entre las dos curvas da la impresión de que debe estar más próxima al límite inferior. Se pueden hacer algunos cálculos más para precisar más los límites, pero sería necesario disminuir el valor de Δu, y aumentar el número de cifras decimales con objeto de reducir la imprecisión numérica de los cálculos para este potencial. Y utilizando métodos analíticos se obtiene una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (véase apéndice G) que da el valor $\alpha = 0.0977$ para la menor energía permitida. La concordancia con este cálculo numérico es buena, pero no perfecta debido a la imprecisión numérica mencionada. La solución analítica también muestra que existen dos energías ligadas permitidas que corresponden a $\alpha = 0.375$ y $\alpha = 0.810$. Por supuesto, que cualquier energía no ligada correspondiente a $\alpha \geq 1$, está permitida.

La técnica que se ha utilizado se llama *integración numérica*. El primer vocablo es apropiado ya que se empieza con una ecuación que contiene $d^2\psi/dx^2$ y se obtiene finalmente ψ misma; por lo tanto, se ha realizado un proceso inverso a la diferenciación.

Si el estudiante tiene acceso a una máquina calculadora, encontrará fácil e interesante el realizar una integración numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Si tiene acceso a una computadora, aun del tamaño más pequeño, encontrará que realizando integraciones numéricas para estados ligados y no ligados en varios potenciales, rápidamente puede desarrollar un sentimiento intuitivo para muchos de los hechos importantes de la mecánica cuántica.

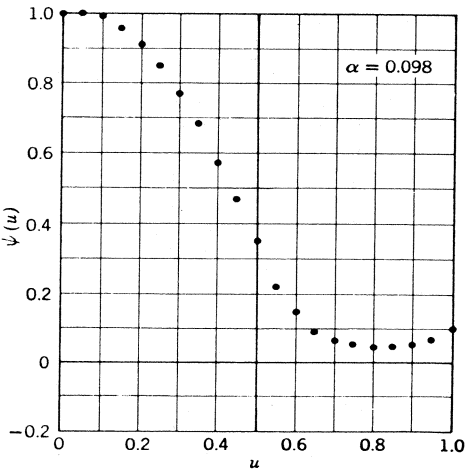


FIGURA F-3
Una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un pozo de potencial cuadrado. La solución se va a más infinito para u grande debido a que el valor supuesto para la energía total es ligeramente pequeño.

Apéndice G

Solución analítica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de pozo cuadrado

Siguiendo el procedimiento que se estudió cualitativamente en la sección 6-7, aquí se desarrolla la solución general de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para los estados ligados de un pozo de potencial cuadrado de profundidad finita. Se aplican los resultados al caso particular de un pozo de potencial cuadrado con los mismos parámetros que se usaron en la solución numérica del apéndice F.

La descripción del movimiento clásico de una partícula ligada en un pozo cuadrado sugiere que sería más apropiado buscar soluciones a la ecuación de Schrödinger en la forma de ondas estacionarias. Por lo tanto, se toma como una solución general a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la región $-a/2 < x < +a/2$ dado $V(x) = 0$, la eigenfunción de onda estacionaria para partícula libre (6-62) que se escribe como

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} k_I x + B \cos k_I x \qquad -a/2 < x < +a/2 \quad \text{(G-1)}$$

donde

$$k_I = \sqrt{2mE}/\hbar$$

En las regiones $x < -a/2$ y $x > +a/2$ la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene las soluciones generales descritas por (6-63) y (6-64), que son

$$\psi(x) = Ce^{k_{II}x} + De^{-k_{II}x} \qquad x < -a/2 \quad \text{(G-2)}$$

y

$$\psi(x) = Fe^{k_{II}x} + Ge^{-k_{II}x} \qquad x > +a/2 \quad \text{(G-3)}$$

donde

$$k_I = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \qquad \text{con} \quad E < V_0$$

Para determinar las constantes arbitrarias, primero se impone el requisito de que las eigenfunciones permanezcan finitas para toda x. Considerando (G-2) en el límite $x \to -\infty$. Este requisito exige

$$D = 0 \qquad \text{(G-4)}$$

Similarmente, es necesario hacer

$$F = 0 \tag{G-5}$$

con el propósito de que (G-3) permanezca finita en el límite $x \to +\infty$. A continuación se impone el requisito de que las eigenfunciones y sus primeras derivadas sean continuas en $x = -a/2$ y $x = +a/2$. con lo que se obtienen las cuatro ecuaciones

$$-A \operatorname{sen}(k_I a/2) + B \cos(k_I a/2) = Ce^{-k_{II}a/2} \tag{G-6}$$

$$Ak_I \cos(k_I a/2) + Bk_I \operatorname{sen}(k_I a/2) = Ck_{II}e^{-k_{II}a/2} \tag{G-7}$$

$$A \operatorname{sen}(k_I a/2) + B \cos(k_I a/2) = Ge^{-k_{II}a/2} \tag{G-8}$$

$$Ak_I \cos(k_I a/2) - Bk_I \operatorname{sen}(k_I a/2) = -Gk_{II}e^{-k_{II}a/2} \tag{G-9}$$

Restando (G-6) de (G-8) se obtiene

$$2A \operatorname{sen}(k_I a/2) = (G - C)e^{-k_{II}a/2} \tag{G-10}$$

Sumando (G-6) y (G-8)

$$2B \cos(k_I a/2) = (G + C)e^{-k_{II}a/2} \tag{G-11}$$

Restando (G-9) y (G-7)

$$2Bk_I \operatorname{sen}(k_I a/2) = (G + C)k_{II}e^{-k_{II}a/2} \tag{G-12}$$

Sumando (G-9) y (G-7)

$$2Ak_I \cos(k_I a/2) = -(G - C)k_{II}e^{-k_{II}a/2} \tag{G-13}$$

Exigiendo que $B \neq 0$ y $(G + C) \neq 0$, se puede dividir (G-12) entre (G-11) y obtener

$$k_I \tan(k_I a/2) = k_{II} \qquad \text{si } B \neq 0 \text{ y } (G + C) \neq 0 \tag{G-14}$$

Exigiendo que $A \neq 0$ y $(G - C) \neq 0$, se puede dividir (G-13) entre (G-10) resultando

$$k_I \cot(k_I a/2) = -k_{II} \qquad \text{si } A \neq 0 \text{ y } (G - C) \neq 0 \tag{G-15}$$

Es fácil ver que (G-14) y (G-15) no se pueden satisfacer simultáneamente. Si se pudiera, la ecuación que se obtiene de sumarlas

$$k_I \tan(k_I a/2) + k_I \cot(k_I a/2) = 0$$

sería válida. Multiplicando por $\tan(k_I a/2)$ la ecuación resulta en

$$k_I \tan^2(k_I a/2) + k_I = 0$$

o

$$\tan^2(k_I a/2) = -1$$

que no puede ser válida si tanto k_I como $a/2$ son reales. Entonces, solamente es posible que o satisfacen (G-14) pero no (G-15), o satisfacen (G-15) pero no (G-14). Las eigenfunciones del pozo de potencial cuadrado forman dos clases. Para la *primera clase*

$$\begin{aligned} k_I \tan(k_I a/2) &= k_{II} \\ A &= 0 \\ G - C &= 0 \end{aligned} \tag{G-16}$$

y entonces (G-8) resulta en

$$B \cos (k_I a/2) = Ge^{-k_{II}a/2}$$
$$G = B \cos (k_I a/2)e^{k_{II}a/2} = C$$

y las eigenfunciones son

$$\psi(x) = \begin{cases} [B \cos (k_I a/2)e^{k_{II}a/2}]e^{k_{II}x} & x < -a/2 \\ [B] \cos (k_I x) & -a/2 < x < a/2 \\ [B \cos (k_I a/2)e^{k_{II}a/2}]e^{-k_{II}x} & x > a/2 \end{cases} \quad \text{(G-17)}$$

Para la *segunda clase*

$$k_I \cot (k_I a/2) = -k_{II}$$
$$B = 0 \quad \text{(G-18)}$$
$$G + C = 0$$

Entonces (G-8) resulta en

$$A \operatorname{sen} (k_I a/2) = Ge^{-k_{II}a/2}$$
$$G = A \operatorname{sen} (k_I a/2)e^{k_{II}a/2} = -C$$

y las eigenfunciones son

$$\psi(x) = \begin{cases} [-A \operatorname{sen}(k_I a/2)e^{k_{II}a/2}]e^{k_{II}x} & x < -a/2 \\ [A] \operatorname{sen}(k_I x) & -a/2 < x < a/2 \\ [A \operatorname{sen}(k_I a/2)e^{k_{II}a/2}]e^{-k_{II}x} & x > a/2 \end{cases} \quad \text{(G-19)}$$

Considérese la primera de las (G-16). Evaluando k_I y k_{II}, y multiplicando por $a/2$, la ecuación queda

$$\sqrt{mEa^2/2\hbar^2} \tan (\sqrt{mEa^2/2\hbar^2}) = \sqrt{m(V_0 - E)a^2/2\hbar^2} \quad \text{(G-20)}$$

Para una partícula dada de masa m y un pozo de potencial dado de profundidad V_0 y ancho a existe una ecuación en una incógnita E. Sus soluciones son los valores permitidos para la energía total de la partícula que son los eigenvalores para las eigenfunciones de primera clase. Las soluciones de esta ecuación trascendente solamente se pueden obtener por métodos numéricos o gráficos. Se presenta un método gráfico simple que ilustrará los rasgos importantes de la ecuación. Haciendo el cambio de variable

$$\mathscr{E} \equiv \sqrt{mEa^2/2\hbar^2} \quad \text{(G-21)}$$

así que la ecuación resulta

$$\mathscr{E} \tan \mathscr{E} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathscr{E}^2} \quad \text{(G-22)}$$

si se grafica la función

$$p(\mathscr{E}) = \mathscr{E} \tan \mathscr{E}$$

y la función

$$q(\mathscr{E}) = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathscr{E}^2}$$

Las intersecciones especifican los valores de $\mathscr{E}$ que son soluciones de (G-22).

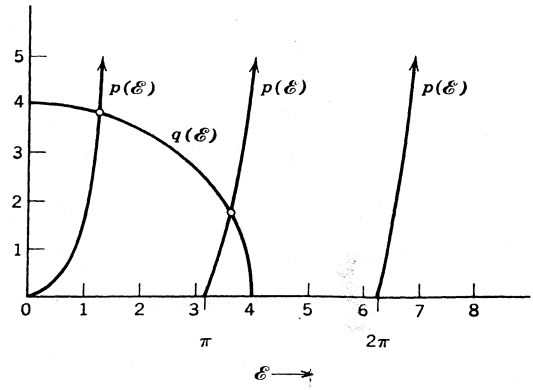


FIGURA G-1
Solución gráfica de la ecuación para eigen valores de primera clase para un pozo de potencial cuadrado particular. Solución de

$$\mathscr{E} \tan \mathscr{E} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathscr{E}^2}$$

o $p(\mathscr{E}) = q(\mathscr{E})$.

En la figura G-1 se muestra esta gráfica. La función $p(\mathscr{E})$ tiene ceros en $\mathscr{E} = 0, \pi, 2\pi, \ldots$ y tiene asíntotas en $\mathscr{E} = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \ldots$. La función $q(\mathscr{E})$ es un cuarto de círculo de radio $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$. De la figura es evidente que el número de soluciones que existen para (G-22) dependen del radio del círculo, cada solución resulta un eigenvalor para $E < V_0$ que corresponde a una eigenfunción de la primera clase. Si $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < \pi$; existe uno de estos eigenvalores; dos si $\pi \leq \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 2\pi$; tres si $2\pi \leq \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 3\pi$; etc...
El caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$ se ilustra en la figura. Observe que esto corresponde a $2mV_0a^2/\hbar^2 = 64$, que es el valor utilizado en la integración numérica del apéndice F. Para este caso existen dos soluciones: $\mathscr{E} \simeq 1.25$ y $\mathscr{E} \simeq 3.60$. De (G-21), los eigenvalores son

$$E = \mathscr{E}^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} = \mathscr{E}^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0a^2} V_0 \simeq \left(\frac{1.25}{4}\right)^2 V_0 \simeq 0.0977 V_0$$

y

$$E = \mathscr{E}^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0a^2} V_0 \simeq \left(\frac{3.60}{4}\right)^2 V_0 \simeq 0.810 V_0$$

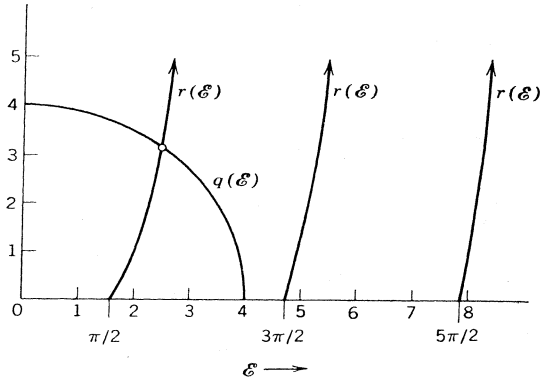


FIGURA G-2
Solución gráfica de la ecuación de eigen valores de segunda clase para un pozo de potencial cuadrado particular. Solución de

$$-\mathscr{E} \cot \mathscr{E} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathscr{E}^2}$$

o $r(\mathscr{E}) = q(\mathscr{E})$.

Los eigenvalores que corresponden a eigenfunciones de la segunda clase se determinan de las soluciones de una ecuación análoga que se obtiene de (G-18), y que es

$$-\mathscr{E}\cot\mathscr{E} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathscr{E}^2} \qquad \text{(G-23)}$$

La figura G-2 muestra la solución de esta ecuación. Es evidente que no habrá eigenvalores para $E < V_0$ que corresponden a eigenfunciones de la segunda clase si $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < \pi/2$; habrá uno si $\pi/2 \leq \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 3\pi/2$; dos si $3\pi/2 \leq \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 5\pi/2$; etc. La figura muestra el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$. La solución simple a (G-23) es $\mathscr{E} \simeq 2.47$, y el eigenvalor es

$$E = \mathscr{E}^2\frac{2\hbar^2}{mV_0a^2}V_0 \simeq \left(\frac{2.47}{4}\right)^2 V_0 \simeq 0.383V_0$$

Se ve que para un pozo de potencial dado solamente existe un número restringido de valores permitidos de la energía total E para $E < V_0$. Estos son los eigenvalores discretos para los estados ligados de la partícula. Por otra parte, se sabe que para $E > V_0$; está permitido cualquier valor de E; los eigenvalores para los estados no ligados forman un continuo. Para un pozo de potencial poco profundo o muy estrecho o ambas cosas, solamente uno de los eigenvalores de la primera clase será ligado. Incrementando los valores de $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$ se encontrará un eigenvalor ligado de la segunda clase. De este parámetro para valores aún más grandes se tendrá otro eigenvalor más de la primera clase. A continuación, otro eigenvalor de la segunda clase queda ligado, etc. Considerando como ejemplo el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$. El potencial y los eigenvalores discretos y continuos están ilustrados a escala en la figura G-3. Se ha utilizado los números cuánticos $n = 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ para marcar los eigenvalores en orden creciente de energía. Para este potencial sólo los tres primeros eigenvalores son ligados.

De las soluciones E de (G-22) y (G-23) para un valor dado de $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$, se pueden evaluar las formas explícitas de las eigenfunciones (G-17) y (G-19). Las relaciones requeridas son

$$k_{\mathrm{I}}\frac{2}{a} = \mathscr{E} \quad \text{y} \quad k_{\mathrm{II}}\frac{a}{2} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathscr{E}^2} \qquad \text{(G-24)}$$

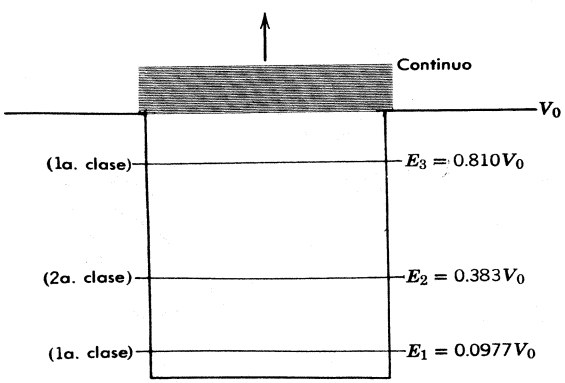


FIGURA G-3
Los eigenvalores para un pozo de potencial cuadrado particular.

El valor de la constante A o B se puede ajustar de modo que cada eigenfunción satisfaga la condición de normalización. Para el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$, las tres eigenfunciones normalizadas que corresponden a los eigenvalores E_1, E_2, E_3 son

$$\psi_1(x) = \begin{cases} 17.9\dfrac{1}{\sqrt{a}}e^{3.80\frac{x}{a/2}} & x \le -a/2 \\ 1.26\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(1.25\dfrac{x}{a/2}\right) & -a/2 \le x \le a/2 \\ 17.9\dfrac{1}{\sqrt{a}}e^{-3.80\frac{x}{a/2}} & x \ge a/2 \end{cases}$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} -18.6\dfrac{1}{\sqrt{a}}e^{3.16\frac{x}{a/2}} & x \le -a/2 \\ 1.23\dfrac{1}{\sqrt{a}}\operatorname{sen}\left(2.47\dfrac{x}{a/2}\right) & -a/2 \le x \le a/2 \\ 18.6\dfrac{1}{\sqrt{a}}e^{-3.16\frac{x}{a/2}} & x \ge a/2 \end{cases} \quad \text{(G-25)}$$

$$\psi_3(x) = \begin{cases} -5.80\dfrac{1}{\sqrt{a}}e^{1.74\frac{x}{a/2}} & x \le -a/2 \\ 1.13\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(3.60\dfrac{x}{a/2}\right) & -a/2 \le x \le a/2 \\ -5.80\dfrac{1}{\sqrt{a}}e^{-1.74\frac{x}{a/2}} & x \ge a/2 \end{cases}$$

En la figura G-4 se representa como función de $x/(a/2)$ las eigenfunciones multiplicadas por $\sqrt{a}$,

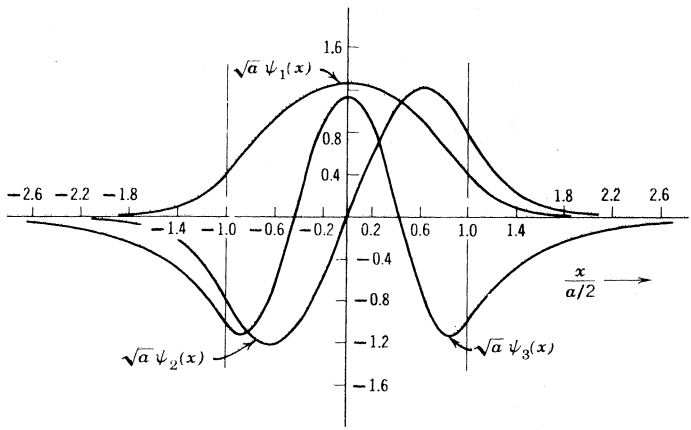


FIGURA G-4
Las eigenfunciones para los eigenestados ligados de un pozo de potencial cuadrado particular.

Apéndice H

Solución en serie de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de oscilador armónico simple

En este apéndice se utilizarán técnicas analíticas para resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula de masa m ligada en el potencial de oscilador armónico simple

$$V(x) = \frac{C}{2}x^2 \tag{H-1}$$

donde C es la constante de la fuerza restauradora lineal. Estas técnicas se estudian ampliamente no sólo por la importancia del oscilador armónico simple, sino también porque la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el átomo con un sólo electrón incluye técnicas que son casi idénticas. Los estudiantes con inclinación matemática encontrarán esto muy interesante.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{C}{2}x^2\psi = E\psi \tag{H-2}$$

Si se evalúa la constante de fuerza C en términos de la frecuencia clásica de oscilación.

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{C}{m}} \tag{H-3}$$

la ecuación resulta

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2\pi^2 m\nu^2 x^2\psi = E\psi$$

o

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{2\pi m\nu}{\hbar}\right)^2 x^2\right]\psi = 0$$

Introduciendo los parámetros

$$\alpha = 2\pi m\nu/\hbar \quad \text{y} \quad \beta = 2mE/\hbar^2 \tag{H-4}$$

La ecuación toma la forma más condensada

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0 \tag{H-5}$$

Resulta conveniente expresar esto en términos de la variable adimensional

$$u = \sqrt{\alpha}\, x = \left[\frac{2\pi m}{\hbar 2\pi}\left(\frac{C}{m}\right)^{1/2}\right]^{1/2} x = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}\, x \tag{H-6}$$

Se tiene

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{du}{dx}\frac{d\psi}{du} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d\psi}{du}$$

y

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{du}{dx}\frac{d}{du}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \alpha\frac{d^2\psi}{du^2}$$

De modo que la ecuación resulta

$$\alpha\frac{d^2\psi}{du^2} + (\beta - \alpha u^2)\psi = 0$$

o

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2\right)\psi = 0 \tag{H-7}$$

Se deben encontrar soluciones para las cuales $\psi(x)$ y su primera derivada sean monovaluadas, continuas y finitas para toda u desde $-\infty$ a $+\infty$. Las primeras dos condiciones se satisfarán automáticamente por las soluciones que se obtendrán. Sin embargo, será necesario tomar en consideración explícitamente el requisito de que $\psi(u)$ permanezca finita cuando $|u| \to \infty$. Para este propósito es útil considerar primero la forma de $\psi(u)$ para valores muy grandes de $|u|$.

Ahora, para cualquier valor finito de la energía total E, la cantidad β/α resulta insignificante comparada con u^2 para valores muy grandes de $|u|$. Entonces de (H-7) se podrá escribir

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2\psi \qquad |u| \to \infty \tag{H-8}$$

La solución general para esta ecuación diferencial es

$$\psi = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2} \tag{H-9}$$

donde A y B son constantes arbitrarias. Se verifica que esta es una solución a (H-8) calculando

$$\frac{d\psi}{du} = A(-u)e^{-u^2/2} + Bue^{u^2/2}$$

y

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{du^2} &= A(-u)^2e^{-u^2/2} - Ae^{-u^2/2} + Bu^2e^{u^2/2} + Be^{u^2/2} \\ &= A(u^2 - 1)e^{-u^2/2} + B(u^2 + 1)e^{u^2/2}\end{aligned}$$

Puesto que, para $|u| \to \infty$, esto esencialmente es

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = Au^2e^{-u^2/2} + Bu^2e^{u^2/2}$$

o

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2(Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}) = u^2\psi$$

es obvio que (H-8) se satisface idénticamente.

Enseguida, se aplica la condición de que las eigenfunciones deben permanecer finitas cuando $|u| \to \infty$. Es claro de (H-9) que esto requiere que se haga $B = 0$. Entonces la forma de las eigenfunciones para $|u|$ muy grandes deberán ser

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} \qquad |u| \to \infty \quad \text{(H-10)}$$

La forma que se encontró en (H-10) sugiere que se habrá de buscar soluciones para la ecuación diferencial desarrollada totalmente, (H-7) y que se puedan escribir

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2}H(u) \qquad \text{(H-11)}$$

Estas soluciones deben de ser válidas para *toda* u. Por lo tanto, para que (H-11) esté de acuerdo con (H-10) la $H(u)$ deberán ser funciones que varíen lentamente comparadas con $e^{-u^2/2}$ cuando $|u| \to \infty$, En lo que resta, la $H(u)$ deberá tener cualquier forma de las requeridas para obtener las formas correctas para la $\psi(u)$. Para evaluar la $H(u)$, se calcula

$$\frac{d\psi}{du} = -Aue^{-u^2/2}H + Ae^{-u^2/2}\frac{dH}{du}$$

y

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{du^2} &= -Ae^{-u^2/2}H + Au^2e^{-u^2/2}H - Aue^{-u^2/2}\frac{dH}{du} \\ &\quad -Aue^{-u^2/2}\frac{dH}{du} + Ae^{-u^2/2}\frac{d^2H}{du^2} \\ &= Ae^{-u^2/2}\left(-H + u^2H - 2u\frac{dH}{du} + \frac{d^2H}{du^2}\right)\end{aligned}$$

y substituyendo ψ y $d^2\psi/du^2$ en (H-7) se obtiene

$$Ae^{-u^2/2}\left(-H + u^2H - 2u\frac{dH}{du} + \frac{d^2H}{du^2}\right) + \frac{\beta}{\alpha}Ae^{-u^2/2}H - Au^2e^{-u^2/2}H = 0$$

Dividiendo entre $Ae^{-u^2/2}$, y cancelando términos que contengan u^2H, se tiene

$$\frac{d^2H}{du^2} - 2u\frac{dH}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1\right)H = 0 \qquad \text{(H-12)}$$

Esta ecuación diferencial determina las funciones $H(u)$.

Recapitulando. Se empieza con la ecuación de Schrödinger (H-7). Por razones que se explicarán, esta ecuación no se puede resolver directamente. Sin embargo, escribiendo las soluciones a la ecuación como productos de la función $Ae^{-u^2/2}$, que es de la forma de las soluciones para $|u| \to \infty$, multiplicada

por las funciones $H(u)$, se transforma el problema al de resolver (H-12) Esta ecuación es soluble mediante la *técnica de series de potencias;* que es la técnica más general de que se dispone para la solución analítica de una ecuación diferencial. Se empieza por suponer que la solución se puede escribir como una serie de potencias en la variable independiente. Esto, es, se supone

$$H(u) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l u^l \equiv a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3 + \cdots \tag{H-13}$$

Los coeficientes $a_0, a_1, a_2, \ldots$ se determinan substituyendo (H-13) en (H-12) y exigiendo que la ecuación resultante se satisfaga para cualquier valor de u. Calculando las derivadas

$$\frac{dH}{du} = \sum_{l=1}^{\infty} l a_l u^{l-1} \equiv 1a_1 + 2a_2 u + 3a_3 u^2 + \cdots$$

y

$$\frac{d^2H}{du^2} = \sum_{l=2}^{\infty} (l-1) l a_l u^{l-2} \equiv 1 \cdot 2a_2 + 2 \cdot 3a_3 u + 3 \cdot 4a_4 u^2 + \cdots$$

y substituyendo en la ecuación diferencial, para obtener

$$\begin{aligned} &1 \cdot 2a_2 + 2 \cdot 3a_3 u + 3 \cdot 4a_4 u^2 + 4 \cdot 5a_5 u^3 + \cdots \\ &-2 \cdot 1a_1 u - 2 \cdot 2a_2 u^2 - 2 \cdot 3a_3 u^3 - \cdots \\ &+ (\beta/\alpha - 1)a_0 + (\beta/\alpha - 1)a_1 u + (\beta/\alpha - 1)a_2 u^2 + (\beta/\alpha - 1)a_3 u^3 + \cdots = 0 \end{aligned}$$

Ya que esto es cierto para todos los valores de u, los coeficientes de cada potencia de u deberán anularse individualmente de modo que la validez de la ecuación no dependa del valor de u. Reuniendo los coeficientes e igualándolos a cero se tiene

$$\begin{aligned} u^0: &\quad 1 \cdot 2a_2 + (\beta/\alpha - 1)a_0 = 0 \\ u^1: &\quad 2 \cdot 3a_3 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 1)a_1 = 0 \\ u^2: &\quad 3 \cdot 4a_4 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 2)a_2 = 0 \\ u^3: &\quad 4 \cdot 5a_5 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 3)a_3 = 0 \end{aligned}$$

para la l-ésima potencia de u, la relación es

$$u^l: \quad (l+1)(l+2)a_{l+2} + (\beta/\alpha - 1 - 2l)a_l = 0$$

o

$$a_{l+2} = -\frac{(\beta/\alpha - 1 - 2l)}{(l+1)(l+2)} a_l \tag{H-14}$$

que se le denomina *relación de recurrencia.*

La relación permite calcular, sucesivamente, los coeficientes $a_2, a_4, a_6, \ldots$ en términos de a_0 y los coeficientes $a_3, a_5, a_7, \ldots$ en términos de a_1 y los coeficientes a_0, y a_1 no están determinados por la relación de recurrencia, pero es como si lo estuvieran. Ya que la ecuación diferencial para $H(u)$ contiene una segunda derivada su *solución general* debería contener dos constantes arbitrarias. Entonces se ve que la solución general se parte en dos series independientes que se escriben

$$H(u) = a_0 \left(1 + \frac{a_2}{a_0} u^2 + \frac{a_4}{a_2}\frac{a_2}{a_0} u^4 + \frac{a_6}{a_4}\frac{a_4}{a_2}\frac{a_2}{a_0} u^6 + \cdots\right)$$

$$+ a_1\left(u + \frac{a_3}{a_1}u^3 + \frac{a_5}{a_3}\frac{a_3}{a_1}u^5 + \frac{a_7}{a_5}\frac{a_5}{a_3}\frac{a_3}{a_1}u^7 + \cdots\right) \qquad \text{(H-15)}$$

Las razones a_{l+2}/a_l están dadas por la relación de recurrencia. La primera serie es una función par de u y la segunda es una función impar de esta variable. La razón por la que (H-7) no se puede resolver directamente mediante la aplicación de la técnica de series de potencias es que ésta conduce a una relación de recurrencia que contiene más de dos coeficientes. Esto lo puede demostrar el estudiante de inmediato aplicando la técnica. Si intenta escribir una ecuación análoga a (H-15), verá que la técnica falla ya que en una ecuación que contiene una segunda derivada sólo pueden existir dos constantes arbitrarias en su solución. Se pudo superar la dificultad transformando el problema por el de resolver (H-12). Esencialmente el mismo truco tiene éxito para las ecuaciones diferenciales que surgen en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial de Coulomb. $V(r) \propto r^{-1}$, de un átomo con un electrón. Existen otros potenciales para los cuales el truco no funciona y no existe solución analítica. Por supuesto, *cualquier* potencial se puede tratar por las técnicas numéricas del apéndice F.

Para un valor arbitrario de β/α, tanto la serie par como la impar (H-15) contendrán un número infinito de términos. Como se verá, esto no conduce a eigenfunciones *aceptables*. Considérese ambas series y evalúe la razón de los coeficientes de potencias sucesivas de u para l grandes. Esto da

$$\frac{a_{l+2}}{a_l} = -\frac{(\beta/\alpha - 1 - 2l)}{(l+1)(l+2)} \simeq \frac{2l}{l^2} = \frac{2}{l}$$

Comparándola con la misma razón para la expansión en series de potencias de la función e^{u^2}, que es

$$e^{u^2} = 1 + u^2 + \frac{u^4}{2!} + \frac{u^6}{3!} + \cdots + \frac{u^l}{(l/2)!} + \frac{u^{l+1}}{(l/2+1)!} + \cdots$$

Para l grandes, la razón de los coeficientes de potencias sucesivas de u es

$$\frac{1/(l/2+1)!}{1/(l/2)!} = \frac{(l/2)!}{(l/2+1)!} = \frac{(l/2)!}{(l/2+1)(l/2)!} = \frac{1}{l/2+1} \simeq \frac{1}{l/2} = \frac{2}{l}$$

Las dos razones son la misma. Lo que significa que los términos de las potencias altas en las series para e^{u^2} pueden diferir de los términos correspondientes en las series pares de $H(u)$ por no más que una constante multiplicativa K. Sólo pueden diferir de los términos en las series impares de $H(u)$ por u veces otra constante K'. Pero para $|u| \to \infty$, los términos de las potencias bajas en u no son importantes para la determinación del valor de cualesquiera de estas series. En consecuencia, se concluye que

$$H(u) = a_0 K e^{u^2} + a_1 K' u e^{u^2} \qquad |u| \to \infty$$

Según (H-11), las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo son

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

Entonces, si las series de $H(u)$ contienen un número infinito de términos, el comportamiento de estas soluciones para $|u| \to \infty$ es

$$A e^{-u^2/2} H(u) = a_0 A K e^{u^2/2} + a_1 A K' e^{u^2/2} \qquad |u| \to \infty$$

Pero esto aumenta sin límite conforme $|u| \to \infty$, que no es un comportamiento aceptable para una eigenfunción. Sin embargo, se pueden obtener eigenfunciones aceptables para *ciertos valores* de β/α. En *cualesquiera* de ellas se hace la constante arbitraria a_0, igual a cero. Entonces se fuerza a que la serie restante de *H(u) termine,* haciendo

$$\beta/\alpha = 2n + 1 \tag{H-16}$$

donde

$$n = 1, 3, 5, \ldots \qquad \text{si } a_0 = 0$$

$$n = 0, 2, 4, \ldots \qquad \text{si } a_1 = 0$$

De (H-14) es obvio que este escogimiento de β/α ocasionará que la serie termine en el n-ésimo término ya que se tendrá, para $l = n$

$$a_{n+2} = -\frac{(\beta/\alpha - 1 - 2n)}{(n+1)(n+2)} a_n = -\frac{(2n + 1 - 1 - 2n)}{(n+1)(n+2)} a_n = 0$$

Los coeficientes $a_{n+4}, a_{n+6}, a_{n+8}, \ldots$ también serán cero ya que son proporcionales a a_{n+2}. La solución resultante $H_n(u)$ son polinomios de orden u llamados *polinomios de Hermite.* Cada $H_n(u)$ se puede evaluar de (H-15) calculando los coeficientes a partir de la relación de ocurrencia con β/α dado por (H-16) para el valor de n correspondiente. En la tabla 6-1 se pueden ver los primeros polinomios de Hermite. Estos son factores que multiplican $A_n e^{-u^2/2}$ (En cada caso la constante arbitraria a_0 o a_1 se ha escogido de tal modo que los coeficientes de cada potencia de u se puedan escribir como enteros simples).

Para las soluciones en polinomios a la *ecuación diferencial de Hermite* (H-12), las eigenfunciones correspondientes

$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u) \tag{H-17}$$

tendrán siempre el comportamiento aceptable yéndose a cero conforme $|u| \to \infty$. La razón es que, para $|u|$, grandes la función exponencial $e^{-u^2/2}$ varía mucho más rápidamente que el polinomio $H_n(u)$ que domina completamente el comportamiento de las eigenfunciones.

Evaluando α y β de (H-4) se obtiene inmediatamente de (H-16)

$$\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{\hbar}{2\pi m\nu} = \frac{2E}{2\pi\hbar\nu} = \frac{2E}{h\nu} = 2n + 1$$

o

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{H-18}$$

Estos son los eigenvalores del potencial de oscilador armónico simple expresados en término de su frecuencia de oscilación clásica.

Apéndice I

El laplaciano y los operadores de impulso angular en coordenadas polares esféricas

El operador Laplaciano

El operador Laplaciano ∇^2 que aparece en la ecuación de Schrödinger tridimensional, está definido en coordenadas rectangulares

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{I-1}$$

Aquí se muestra la manera de transformar el operador a la forma que toma en coordenadas polares esféricas, que es

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{dr}\right) + \frac{1}{r^2\text{sen}^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2\,\text{sen}\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \tag{I-2}$$

La forma más directa de llevar a cabo la transformación es hacer aplicaciones repetidas de la "regla de la cadena" de la diferenciación parcial. Este es un procedimiento tedioso. Pero el primer término de (I-2) se puede obtener sin mucho tedio considerando un caso en el cual el laplaciano opera sobre una función $\psi = \psi(r)$ de la coordenada radial solamente. En este caso, las derivadas en los dos últimos términos de (I-2) dan cero y se tiene

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)$$

Esta expresión se obtendrá de

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

que es el laplaciano (I-1) a coordenadas rectangulares, operando sobre $\psi(r)$. Para hacer esto, se utiliza la relación

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

que conecta las coordenadas rectangulares y las polares esféricas (véase figura 7-2)

Evaluando

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}\frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{x}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}$$

y

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) = \frac{\partial x}{\partial x}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + x\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + x\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

Similarmente, las derivadas de y y z son

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{y^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

y

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{z^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

Sumando estas tres expresiones, se obtiene

$$\nabla^2 \psi = \frac{3}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

o

$$\nabla^2 \psi = \frac{3}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

Obsérvese que la expresión anterior se reduce a

$$\nabla^2 \psi = \frac{3}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + r\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}\right)$$

o

$$\nabla^2 \psi = \frac{2}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Obsérvese también que el primer término de (I-2), esto es

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)$$

se reduce a

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2}\left(2r\frac{\partial \psi}{\partial r} + r^2\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}\right)$$

o

$$\nabla^2 \psi = \frac{2}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Una comparación muestra que la expresión que se obtuvo es idéntica al primer término de (I-2). El segundo y tercer términos se pueden obtener tomando $\psi = \psi(\varphi)$ y a continuación $\psi = \psi(\theta)$.

Los operadores de impulso angular

En coordenadas rectangulares los operadores para las tres componentes del impulso angular orbital son

$$L_{x_{op}} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_{y_{op}} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$L_{z_{op}} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{I-3}$$

Cuando se transforman a coordenadas polares esféricas estos operadores toman las formas

$$L_{x_{op}} = i\hbar\left(\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_{y_{op}} = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_{z_{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{I-4}$$

Tomando como ejemplo $L_{z_{op}}$ que es el caso más simple, se mostrará que estas expresiones son equivalentes. Para hacerlo se usarán las relaciones

$$x = r\operatorname{sen}\theta\cos\varphi$$

$$y = r\operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\varphi$$

$$z = r\cos\theta \tag{I-5}$$

que conectan las coordenadas rectangulares y polares esféricas (véase figura 7-2).

Es más fácil si se empieza por aplicar la regla de la cadena y obtener $\partial\psi/\partial\varphi$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi}$$

De (I-5), se tiene

$$\frac{\partial x}{\partial\varphi} = -r\operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\varphi = -y$$

$$\frac{\partial y}{\partial\varphi} = r\operatorname{sen}\theta\cos\varphi = x$$

$$\frac{\partial z}{\partial\varphi} = 0$$

Entonces,

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = -y\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial\psi}{\partial y}$$

Como ecuación entre operadores, queda

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}$$

que verifica la equivalencia de las dos formas de $L_{z_{op}}$ expresadas en (I-3) e (I-4). Se puede hacer cálculos similares para $L_{x_{op}}$ y $L_{y_{op}}$.

En coordenadas rectangulares, el operador para el cuadrado de la magnitud del impulso angular orbital es

$$L^2_{\text{op}} = L^2_{x_{\text{op}}} + L^2_{y_{\text{op}}} + L^2_{z_{\text{op}}} \tag{I-6}$$

Elevando al cuadrado $L_{x_{\text{op}}}$, $L_{y_{\text{op}}}$ y $L_{z_{\text{op}}}$ y sumando se encuentra, después de algunas manipulaciones de las funciones senoidales que

$$L^2_{\text{op}} = -\hbar^2\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{I-7}$$

Obsérvese la relación entre (I-7) y los dos últimos términos de (I-2). Esto forma la base de una forma alternativa para obtener estos términos, que se pueden encontrar en los libros de matemáticas.

Apéndice J

La precesión de Thomas

El efecto relativista que introduce el factor 1/2 en (8-25) para la energía potencial debida a la orientación spin-órbita se llama precesión de Thomas. No es difícil entenderlo si se mantiene la geometría lo suficientemente simple. Para este propósito, suponga que el electrón se mueve alrededor del núcleo en una órbita de Bohr circular, como se muestra en la figura J-1. La figura muestra la situación como vista por un observador en el sistema en reposo xy, fijo en el núcleo. El electrón está momentáneamente en reposo en el sistema x_1y_1 en el instante t_1 y momentáneamente en reposo en el sistema x_2y_2 en un instante ligeramente posterior t_2. Tanto de x_1y_1 según los ve un observador en x_1y_1. No obstante, se mostrará que el observador en xy ve los ejes de x_2y_2 ligeramente girados con relación a sus propios ejes. Ve los ejes del sistema x_3y_3 aún más girados etc. Entonces, observa que el conjunto de ejes en el cual el electrón está instantáneamente en reposo está precediendo, en relación a su propio sistema de ejes, conforme el electrón revoluciona en torno al núcleo aún cuando los observadores instantáneamente en reposo con relación al electrón sostienen que cada conjunto de ejes $x_{n+1}y_{n+1}$ es paralelo al conjunto precedente x_n. Utilizando una secuencia de sistemas de referencia en los cuales el electrón está momentáneamente en reposo y cuyos movimientos relativos entre ellos sean a velocidad constante y con relación al sistema xy, se puede aplicar la teoría especial de la relatividad al problema aún cuando el electrón está acelerado respecto al sistema xy.

La figura J-2 muestra xy, x_1y_1 y x_2y_2 desde el punto de vista del observador en x_1y_1. Puesto que el electrón se está moviendo con velocidad v relativa al

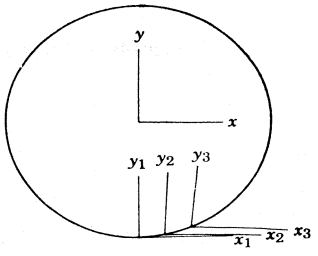


FIGURA J-1
Sistemas de referencia utilizados para calcular la precesión de Thomas.

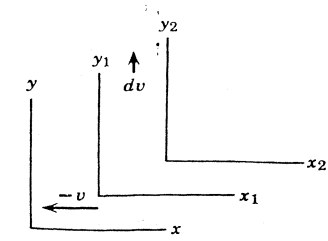


FIGURA J-2
Sistemas de referencia utilizados para calcular la precesión de Thomas, visto el sistema x_1y_1.

núcleo, los ejes xy se mueven con velocidad $-\mathbf{v}$ en la dirección negativa del eje x_1 con relación a x_1y_1. Visto desde x_1y_1 el electrón se está acelerando hacia el núcleo con aceleración **a** en dirección positiva del eje y_1 Si el intervalo de tiempo $(t_2 - t_1)$ es muy pequeño, el cambio en velocidad del electrón en este intervalo es

$$d\mathbf{v} = \mathbf{a}(t_2 - t_1) = \mathbf{a}\, dt \tag{J-1}$$

y ésta será la velocidad de x_2y_2 vista por x_1y_1. Ahora utilizando las ecuaciones de transformación relativistas para la velocidad del apéndice A para evaluar los componentes de $\mathbf{u}_a$, la velocidad de x_2y_2 vista por xy. Esto produce

$$u_{a_x} = \frac{dv_x - v_x}{1 - \dfrac{v_x\, dv_x}{c^2}} = \frac{0 + v}{1 - \dfrac{-v \cdot 0}{c^2}} = v$$

$$u_{a_y} = \frac{dv_y\sqrt{1 - \dfrac{v_x^2}{c^2}}}{1 - \dfrac{v_x\, dv_x}{c^2}} = dv\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Utilizando las mismas ecuaciones de transformación para evaluar las componentes de $\mathbf{u}_b$, la velocidad de xy vista por x_2y_2, se tiene

$$u_{b_x} = \frac{v_x\sqrt{1 - \dfrac{dv_y^2}{c^2}}}{1 - \dfrac{dv_y v_y}{c^2}} = \frac{-v\sqrt{1 - \dfrac{dv^2}{c^2}}}{1 - \dfrac{dv \cdot 0}{c^2}} = -v\sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}$$

$$u_{b_y} = \frac{v_y - dv_y}{1 - \dfrac{dv_y v_y}{c^2}} = -dv$$

Enseguida, calculando el ángulo entre el vector $\mathbf{u}_a$ el eje x del sistema xy. Esto es

$$\theta_a = \frac{u_{a_y}}{u_{a_x}} = \frac{dv\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c^2}}}{v}$$

El ángulo entre el vector $\mathbf{u}_b$ y el eje x del sistema x_2y_2 es

$$\theta_b = \frac{u_{b_y}}{u_{b_x}} = \frac{-dv}{-v\sqrt{1 - \dfrac{dv^2}{c^2}}}$$

La figura J-3 muestra los sistemas x_2y_2 y xy desde el punto de vista de xy. Debido a la equivalencia de los sistemas inerciales, $\mathbf{u}_a$ y $\mathbf{u}_b$ serán opuestas en dirección. Puesto que los ángulos entre los ejes x y los vectores velocidad relativa no son los mismos, el sistema x_2y_2 aparece girado con relación al sistema xy. El ángulo de rotación es

$$d\theta = \theta_b - \theta_a = \left(\frac{dv}{v\sqrt{1 - \dfrac{dv^2}{c^2}}} - \frac{dv}{v}\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right)$$

Como dv es una diferencial, se debe despreciar dv^2/c^2 y obtener

$$d\theta = \frac{dv}{v}\left(1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\right)$$

Como la velocidad de un electrón en un átomo de un solo electrón es relativamente pequeña comparada con la velocidad de la luz $v^2/c^2 \ll 1$. (Esto también es cierto para los electrones causantes del espectro óptico en otros átomos). Entonces se puede obtener una excelente aproximación de $d\theta$ haciendo un desarrollo binomial de la raíz cuadrada manteniendo solo los dos primeros términos. Esto es

$$d\theta \simeq \frac{dv}{v}\left[1 - \left(1 - \frac{v^2}{2c^2}\right)\right]$$
$$= \frac{dv\, v^2}{2vc^2} = \frac{v\, dv}{2c^2} = \frac{va\, dt}{2c^2}$$

donde se ha evaluado dv de (J-1). Los ejes en los cuales el electrón está instantáneamente en reposo preceden con relación al núcleo, con la llamada *frecuencia de Thomas.*

$$\omega_T = \frac{d\theta}{dt} = \frac{va}{2c^2}$$

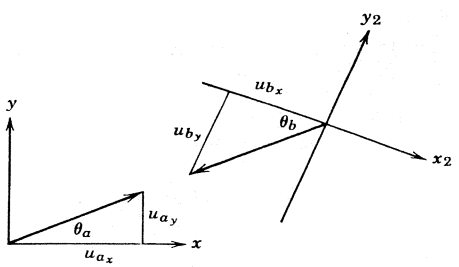


FIGURA J-3
Ilustración exagerada de la precesión de Thomas.

Una inspección a las figuras verificará que el sentido de precesión está dado por la ecuación vectorial

$$\boldsymbol{\omega}_T = -\frac{1}{2c^2}\mathbf{v} \times \mathbf{a} \tag{J-2}$$

Con relación a los sistemas en los cuales el electrón está en reposo, su momento dipolar magnético de spin precede en el campo magnético que experimenta a la frecuencia de Larmor ω. Pero estos sistemas también preceden con frecuencia ω_T relativa al sistema nuclear en reposo. Consecuentemente el momento dipolar se ve que precede con frecuencia angular

$$\boldsymbol{\omega}' = \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega}_T \tag{J-3}$$

Utilizando una ecuación análoga a (8-14) más (8-24) y evaluando g_s y μ_b, se tiene

$$\boldsymbol{\omega} = -\frac{g_s\mu_b}{c^2\hbar}\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{2e\hbar}{2mc^2\hbar}\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{e}{mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{J-4}$$

Para evaluar ω_T en términos similares, se usará la ley de Newton para expresar la aceleración del electrón como función del campo eléctrico $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m = -e\mathbf{E}/m$. Con lo cual (J-2) conduce a

$$\boldsymbol{\omega}_T = \frac{e}{2mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{J-5}$$

Entonces, la frecuencia de precesión en el sistema nuclear en reposo es

$$\boldsymbol{\omega}' = -\frac{e}{mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} + \frac{e}{2mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{e}{2mc^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E} \tag{J-6}$$

Comparando (J-4) y (J-6) se ve que el efecto de transformar la frecuencia de precesión del dipolo magnético de spin, de los sistemas a los cuales el electrón está en reposo, al sistema normal en el cual el núcleo está en reposo, es reducir su magnitud por exactamente un factor de 1/2. Lo mismo ocurre para la energía potencial de orientación ΔE ya que la magnitud de la cantidad es proporcional a la magnitud de la frecuencia de precesión ω. Esto se puede ver de ecuaciones análogas a (8-13) y (8-14)

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = \frac{g_s\mu_b}{\hbar}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

y

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{g_s\mu_b}{\hbar}\mathbf{B}$$

Con lo que se completa la verificación del factor 1/2 en (8-25).

Apéndice K

El principio de exclusión en el acoplamiento *LS*

Si un átomo contiene dos o más electrones que tienen valores comunes de los números cuánticos n y l, por estar en la misma subcapa, el principio de exclusión les impone restricciones sobre los posibles valores de los demás números cuánticos. En la aproximación de Hartree, estos son los números cuánticos m_l y m_s de cada electrón. En este caso, el principio de exclusión establece simplemente que dos electrones no pueden tener el mismo conjunto de los cuatro números cuánticos. En el acoplamiento *LS*, los números cuánticos que se utilizan para cada electrón, además de n y l, son l', s', j', m_j'. Estos números cuánticos especifican el modo en que los electrones interactúan en el acoplamiento *LS*. Las restricciones impuestas sobre los posibles valores de estos números cuánticos para el principio de exclusión son más complicadas pero se pueden determinar como sigue.

Trabajando primero en la aproximación de Hartree, los valores posibles de m_l y m_s se utilizan para determinar los valores posibles de los números cuánticos m_l', m_s', m_j', y de estos se determinan los valores posibles de l', s', j', m_j'. A pesar de que en el acoplamiento *LS* las componentes x de $\mathbf{L}'$ y $\mathbf{S}'$, que están especificadas por m_l' y m_s', se modifican por las interacciones residual de Coulomb y spin-orbita L', S', J', J_z' no se modifican. Por lo tanto, las restricciones que se encuentran en la aproximación de Hartree tocante a los números cuánticos asociados l', s', j', m_j', también se aplican al acoplamiento *LS*.

Como ejemplo se determinarán los números cuánticos del acoplamiento *LS* que satisfacen el principio de exclusión para dos electrones en la subcapa *2p*. Refiriéndonos a la tabla K-1, se enlistan primero todos los posibles conjuntos de valores de m_l y m_s para los dos electrones, los cuales satisfacen el principio de exclusión. Existen 15 diferentes conjuntos de m_l y m_s para los dos electrones que satisfacen el principio de exclusión, y un número de otros, tales como $m_{l_1} = +1$, $m_{s_1} = +1/2$, $m_{l_2} = +1$, $m_{s_2} = +1/2$, que están excluídas porque lo violan. Para cada conjunto se evalúan los valores correspondientes de los números cuánticos m_l', m_s', m_j' a partir de las relaciones $m_l' = m_{l_1} + m_{l_2}$, $m_s' = m_{s_1} + m_{s_2}$, $m_j' = m_l' + m_s'$, que representan las componentes z de las ecuaciones de suma del impulso angular (10-6), (10-8) y (10-10).

Ahora, el problema es identificar los estados cuánticos permitidos especificados en la tabla K-1 en términos de m_l', m_s', m_j', con la especificación de estos estados en términos de l', s', j'. Se empieza utilizando (10-14) que representa otros requisitos de conservación del impulso angular. Haciendo

TABLA K-1. Números cuánticos posibles para una configuración np^2.

Renglón	m_{l_1}	m_{s_1}	m_{l_2}	m_{s_2}	m'_l	m'_s	m'_j
1	+1	+1/2	+1	−1/2	+2	0	+2
2	+1	+1/2	0	+1/2	+1	+1	+2
3	+1	+1/2	0	−1/2	+1	0	+1
4	+1	+1/2	−1	+1/2	0	+1	+1
5	+1	+1/2	−1	−1/2	0	0	0
6	+1	−1/2	0	−1/2	+1	−1	0
7	+1	−1/2	−1	+1/2	0	0	0
8	+1	−1/2	−1	−1/2	0	−1	−1
9	0	+1/2	+1	−1/2	+1	0	+1
10	0	+1/2	0	−1/2	0	0	0
11	0	+1/2	−1	+1/2	−1	+1	0
12	0	+1/2	−1	−1/2	−1	0	−1
13	−1	+1/2	0	−1/2	−1	0	−1
14	−1	+1/2	−1	−1/2	−2	0	−2
15	−1	−1/2	0	−1/2	−1	−1	−2

$l_1 = l_2 = 1$, se encuentra que las combinaciones posibles de l', s', j', expresadas en notación espectroscópica son como sigue $^1S_0$, $^1P_1$, $^1D_2$, $^3S_1$, $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$, $^3D_1$, $^3D_2$, $^3D_3$. The $^3D_3$ Los estados $^3D_3$ se eliminan inmediatamente ya que para estos estados habrá m'_j valores de $+3$ y -3, pero se ve que no están en listados en la tabla K-1. Puesto que no existen estados $^3D_3$, no pueden existir estados $^3D_2$ ó $^3D_1$, todos estos estados K-2 tabla K-1 corresponden a vectores $\mathbf{S}'$ y $\mathbf{L}'$ de la misma magnitud en el mismo multiplete y aparecen o caen juntos. Ahora, el renglón número 1 en la tabla establece que debe haber estados con $s' \geq 0$ y $l' \geq 2$, ya que $m'_s = -s', \ldots, s'$ y $m'_l = -l', \ldots, l'$. Estos requisitos se pueden satisfacer sólo por los estados $^1D_2$. Existen cinco de esos estados que corresponden a los cinco valores $m'_j = -2, -1, 0, 1, 2$. El renglón número 2 establece que deben existir estados con $s' \geq 1$ y $l' \geq 1$. Esto requiere la presencia de los estados $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$. Para $^3P_0$ existe un estado corresponmdiente a $m'_j = 0$. Para $^3P_1$ hay tres estados que corresponden a $m'_j = -1, 0, 1$. Para $^3P_2$ hay cinco correspondientes a $m'_j = -2, -1, 0, 1, 2$. El número de estados que se han identificado son $5 + 1 + 3 + 5 = 14$. Sólo falta un estado simple y debe ser un estado con $m'_j = 0$ ya que se han utilizado todos los otros valores m'_j de la tabla. Entonces es obvio que éste será el estado cuántico simple $^1S_0$.

Se ha encontrado que en la aproximación de Hartree los únicos estados cuánticos posibles para dos electrones con la configuración $2p^2$ son aquellos asociados con los símbolos $^1S_0$, $^1D_2$, $^3P_{0,1,2}$. Esto es igualmente cierto para una configuración np^2 con cualquier n. Puesto que estas restricciones están expresadas en términos de los números cuánticos l', s', j', también son válidas en el acoplamiento *LS*. Observe que estos resultados están de acuerdo con los estados presentes observados en el diagrama de niveles de energía del ^{6}C de la figura 10-8.

Como segundo ejemplo considere seis electrones en la misma subcapa p, esto es, considere la configuración np^6, con cualquier n. La tabla K-2 enlista los estados cuánticos permitidos para este caso en analogía con los enlistados para la configuración np^2, pero en este caso la tabla sólo tiene un renglón. Obviamente, el renglón es el estado simple $^1S_0$. Por supuesto que seis electrones

TABLA K-2. Números cuánticos posibles para una configuración np^6.

Renglón	m_{l_1}	m_{s_1}	m_{l_2}	m_{s_2}	m_{l_3}	m_{s_3}	m_{l_4}	m_{s_4}	m_{l_5}	m_{s_5}	m_{l_6}	m_{s_6}	m'_l	m'_s	m'_j
1	+1	+1/2	+1	−1/2	0	+1/2	0	−1/2	−1	+1/2	−1	−1/2	0	0	0

representan el número máximo que pueden ocupar una subcapa p. Entonces se concluye que cuando esta subcapa está llena su impulso angular de spin total, su impulso angular orbital total y el impulso angular total son cero. Además, es evidente que se obtendrá la misma conclusión para cualquier subcapa completamente llena. La conclusión queda confirmada por el análisis del espectro óptico de los átomos de los gases nobles. También ocurre que si una subcapa completamente llena no tiene spin neto o impulso angular orbital, no puede existir momento magnético dipolar neto. Esto queda confirmado por los experimentos Stern-Gerlach con átomos de gases nobles.

La Tabla K-3 enlista los estados cuánticos permitidos por el principio de exclusión para algunas configuraciones que contienen varios electrones en las misma subcapa. Cada símbolo proporciona los valores l' y s' de un multiplete permitido. A partir de (10-13) y (10-14) es posible determinar, en términos de l' y s', todos los valores posibles de j' y m'_j para los estados de este multiplete. Los renglones están dados para configuraciones que van desde ningún electrón en la subcapa hasta el número máximo de electrones consistente con el principio de exclusión. Para cero electrones $l' = s' = j' = 0$, lo cual está descrito por el símbolo $^1S_0$. Para un electrón en cualquier subcapa $s' = 1/2$, y los estados permitidos son necesariamente $^2S_{1/2}$, ó $^2P_{1/2,3/2}$. Los estados permitidos

TABLA K-3. Números cuánticos posibles para configuraciones que contienen varios electrones en la misma subcapa.

ns^0	^1S						
ns^1		^2S					
ns^2	^1S						
np^0	^1S						
np^1		^2P					
np^2	$^1S, {}^1D$		^3P				
np^3		$^2P, {}^2D$		^4S			
np^4	$^1S, {}^1D$		^3P				
np^5		^2P					
np^6	^1S						
nd^0	^1S						
nd^1		^2D					
nd^2	$^1S, {}^1D, {}^1G$			$^3P, {}^3F$			
nd^3		$^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H$			$^4P, {}^4F$		
nd^4	$^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1H, {}^1I$			$^3P, {}^3F, {}^3P, {}^3D, {}^3F, {}^3G, {}^3H$		^5D	
nd^5		$^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H, {}^2S, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2I$			$^4P, {}^4F, {}^4D, {}^4G$		^6S
nd^6	$^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1H, {}^1I$			$^3P, {}^3F, {}^3P, {}^3D, {}^3F, {}^3G, {}^3H$		^5D	
nd^7		$^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H$			$^4P, {}^4F$		
nd^8	$^1S, {}^1D, {}^1G$			$^3P, {}^3F$			
nd^9		^2D					
nd^{10}	^1S						

para otras configuraciones están determinados por los cálculos de los ejemplos anteriores o por cálculos similares. Los estados permitidos también se pueden obtener de cálculos más elegantes basados en la teoría matemática de los grupos. Es particularmente interesante observar en la tabla K-3 las simetrías alrededor de las configuraciones de subcapa semillena. El número de estados es mayor para esa configuración y los estados para una configuración en la cual una subcapa está llena, excepto por cierto número de electrones son exactamente los mismos que los estados para la configuración en la cual hay justamente este número de electrones en la subcapa. Este resultado también se puede expresar diciendo que los estados permitidos para electrones son los mismos que los estados permitidos para agujeros, un hecho que tiene consecuencias importantes en la física del estado sólido, física nuclear y física atómica. Las simetrías son una demostración contundente del efecto del principio de exclusión ya que, si no fuera por él, el número de estados aumentaría monótonamente conforme aumentara el número de electrones en la subcapa.

Apéndice L

Referencias

Bibliografías incluyendo un comentario breve que caracteriza cada una de ellas.

General

Fundamentals of Modern Physics, por R. Eisberg, Wiley, Nueva York, 1961. (Tratamiento de la mecánica cuántica similar al de este libro, pero más extenso y a un nivel un poco más alto; cobertura de otros tópicos restringidos en esta obra).

Introduction to Modern Physics, por F. Richtmyer, E. Kennard, y J. Cooper (Sexta ed.), McGraw-Hill, Nueva York, 1969. (Comparable en cobertura y nivel a este libro).

Principles of Modern Physics, por N. Ashby y S. Miller, Holden-Day, San Francisco, 1970. (Comparable en cobertura y nivel a este libro).

Introduction to Modern Physics, por J. McGervey, Academic Press, Nueva York, 1971. (Comparable en cobertura a este libro; la mecánica cuántica se trata a un nivel un poco más alto).

Relatividad

Introduction to Special Relativity, por R. Resnick, Wiley, Nueva York, 1968. (Contiene una representación geométrica del espacio-tiempo y un tratamiento accesible de las consecuencias de la relatividad en la teoría electromagnética).

Mecánica Cuántica

Introductory Quantum Mechanics, por V. Rojansky, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Nueva Jersey, 1938. (Una de las introducciones más claras a la teoría de la mecánica cuántica).

Basic Quantum Mechanics, por K. Ziock, Wiley, Nueva York, 1969. (Un desarrollo breve a un nivel algo más alto que el de este libro).

Espectros atómicos y estructura

Atomic Spectra and Atomic Structure, por G. Herzberg, Dover, Nueva York, 1944. (Principalmente un tratamiento descriptivo).

Atomic Spectra, por H. Kuhn, Academic Press, Nueva York, 1962. (Una discusión detallada de los espectros y su interpretación).

Estadística clásica y cuántica

Statistical and Thermal Physics, por F. Reif, McGraw-Hill, Nueva York, 1965. (Un desarrollo completo del tema).

Espectros moleculares y estructura

Elements of Diatomic Molecular Spectra, por H. Dunford, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1968. (El tratamiento más elemental y extenso disponible).

Sólidos

Elementary Solids State Physics, por C. Kittel, Wiley, Nueva York, 1962. (Aproximadamente al mismo nivel de este libro pero con una cobertura de los sólidos mucho más amplia).

Physics of Solids, por C. Wert and R. Thomson, McGraw-Hill, Nueva York, 1964. (Orientado hacia la metalurgia).

Núcleos

Introduction to Nuclear Physics, por H. Enge, Addison-Wesley, Reading, Massachesetts, 1966. (Una cobertura muy completa del experimento y teoría aproximadamente al mismo nivel que en este libro).

Concepts of Nuclear Physics, por B. Cohen, McGraw-Hill, Nueva York, 1971. (Contiene un tratamiento particularmente completo de los modelos de capas y colectivo aproximadamente al mismo nivel que este libro).

Partículas elementales

Introduction to High Energy Physics, por D. Perkins, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1972. (Discute los aspectos teórico y experimental de las partículas elementales a un nivel ligeramente superior al de este libro y con mucha mayor amplitud).

Desarrollos recientes en la física cuántica

El estudiante puede enterarse de los desarrollos más recientes en la física cuántica en una forma relativamente fácil leyendo los artículos de divulgación, pero técnicamente adecuados, que aparecen en casi todos los números de las revistas Physics Today y Scientific American. Están disponibles en la mayoría de las bibliotecas.

Apéndice M

Respuestas a problemas seleccionados

Respuestas para aproximadamente la mitad de aquellos problemas que no están resueltos.

Capítulo 1: (1) 4830 Å (4) 7.53 W (5a) 4.1×10^{9} kg/seg (5b) 6.4×10^{-14} (10b) 281°K (14a) 2.50 (14b) 2.14 (14c) 1.00

Capítulo 2: (1a) no (1b) 5400 Å (5a) 6.6×10^{-34} joule-seg (5b) 2.3 eV (5c) 5400 Å (10) 3.6×10^{-17} W (12) 1.2×10^{20} Hz, 0.024 Å, 2.7×10^{-22} kg-m/seg (16a) 0.027 Å, 0.057 MeV (16b) 0.060 Å, 0.31 MeV (20) 2.64×10^{-5} Å (25a) 2.02 MeV (25b) 29.6%

Capítulo 3: (1a) 1.66×10^{-35} m (3a) 3.31×10^{-24} kg-m/seg, 3.31×10^{-24} kg-m/seg (3b) 0.511 MeV, 6.21 keV (3c) 37.6 eV, 6.21 keV (7) 2.5×10^{-17} m $\simeq 10^{-2} \times$ (radio nuclear) (11) $\theta_{\text{fotón}}/\theta_{\text{elect}} = 5.1$ (16a) 3.98×10^{2} Å (16b) 3.98×10^{6} Å (16c) 3.98×10^{10} Å (22a) ~1 eV (22b) ~10 MeV (22c) ~0.1 MeV (23) $\sim 10^{-3}$ eV

Capítulo 4: (6) 15.8×10^{-15} m (9a) 4170 cuentas/hr (9b) 11 cuentas/hr (12) $F_{\text{grav}}/F_{\text{elect}} \sim 10^{-40}$ (16) 13.46 eV, 7.18×10^{-27} kg-m/sec, 923 Å, 4.29 m/seg, (19a) 1 (19b) 0.529 Å (19c) 1.05×10^{-34} kg-m^2/seg (19d) 1.99×10^{-24} kg-m/seg (19e) 4.14×10^{16}/seg (19f) 2.19×10^{6} m/seg (19g) 8.25×10^{-8} nt (19h) 9.07×10^{22} m/seg (19i) 13.6 eV (19j) −27.2 eV (19k) −13.6 eV (25) 4.91 Å (27) 54.4 eV (32) 2.38 Å

Capítulo 5: (4) $\sqrt{C/mE}/\pi$ (7a) 0.195 (7b) 0.333 (8) 3.4 MeV (10a) $\sqrt{2/a}$ (13a) $1.7\hbar$ (28) 0.4 Å (31) $4.9\,v_0$

Capítulo 6: (9b) 3.05×10^{-5} por protón 2.53×10^{-7} por deuterón (14) $n^2\hbar^2\pi^2/2ma^2$ (17) $4.9\,v_0$ (25a) $2.6\hbar$ (28b) $\sim 10^{36}$ (29) ~0.1 eV

Capítulo 7: (3) $E_{\text{He}}:E_{\text{D}}:E_{\text{H}} = 4.0016:1.0013:1$ (7a) $4a_0$ (7b) $5a_0$ (9a) $-\mu e^4/4(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2$ (9b) $-\mu e^4/4(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2$ (16a) $e^{\pm im\varphi}$ (23a) $m\hbar$ (23b) $\overline{L^2} = \overline{L}^2 = (m\hbar)^2$, so $L = m\hbar$

Capítulo 8: (5a) $(m_l + 2m_s)\mu_b B$ (5c) 4.4×10^{4} tesla (10) $j = 7/2$; $m_j = -7/2, -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2, 7/2$; y $j = 5/2$; $m_j = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$ (18) $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \ldots$

Capítulo 9: (14a) 2.4 (20) probable " " " $7s^15f^{14}6d^9$ (21a) 54 eV (21b) 54 eV (24a) 900 V (24b) 14 Å (26a) $E_K(\text{Fe}) = 7.8 \times 10^3$ eV, $E_K(\text{Co}) = 8.5 \times 10^3$ eV (26b) 8.5×10^3 eV

Capítulo 10: (4a) $s', l', j' = 1/2, 0, 3/2; 1, 2, 2; 2, 1, 3$ (4b) $^2S_{3/2}$ (14) 12 (18a) 1.4 eV (18b) 2×10^4 tesla (18c) no

Capítulo 11: (6b) $v_m = v\sqrt{3N_0/\pi A}$, $\Theta = hv/k\sqrt{3N_0/\pi A}$ (10) 6.4×10^9 neut/m^3 (12a) 5.1×10^{-3} (12b) 0.32 (22) 3.1 eV (24a) $h^2\mathcal{N}^2/32l^2m$ (24b) $\mathscr{E}_F/3$

Capítulo 12: (1) 4.64 eV (4a) $A = 17$ eV, $\rho/R_0 = 1.6$ (10a) 1/73 (10b) 214/1 (13) 2900.8 cm^{-1}, 40 cm^{-1} (18a) 2.49×10^{14} Hz (18b) 3.65×10^3 nt/m

Capítulo 13: (4a) **metálico** (4b) **covalente (semi-conductor)** (4c) **iónico** (4d) **covalente (aislador)** (4e) **molecular** (6) 10^{10} V/m (10) **3 electrones/átomo** (13a) 7.18 eV (13b) **sin cambio** (21) $\mathscr{E}_g/2$

Capítulo 14: (9a) 8.3×10^{-5} amp/m (9b) 7.0×10^2 amp/m (12b) 6.8×10^{-5} (14a) 680 tesla (14b) 1.7×10^6 amp/m (14c) 1.2×10^3 joule

Capítulo 15: (3a) 5.8×10^{-37} MeV (3b) 0.72 MeV (7a) 5.95 MeV (10a) 23.8 MeV (10b) 0.48 MeV (12a) 2.8 MeV (12b) 3.4 F (14a) 7.3 MeV (14b) 14.3 MeV

Capítulo 16: (4) $(1 - e^{-Rt'})I/R$ (7a) 4.0×10^9 yr (7b) 22 g (7c) 1.2×10^{-8} g (9a) 3.9×10^4 m/seg (11a) **permitidas, Gamow-Teller** (11b) **permitida** 10^{-6} **supresión** (11c) **permitida Fermi o Gamow-Teller** (11d) **prohibida,** 10^{-3} **supresión** (20) 78° (23) 3×10^{-5}

Capítulo 17: (8a) 10 (8b) 33° (12a) 5×10 seg (12b) 1 (12c) 4 (15) $6m_0c^2 = 5360$ MeV (16a) $\sim 10^{-43}$ cm^2 (16b) $\sim 10^{18}$ cm

Apéndice N

Constantes usuales y factores de conversión

Se reportan con el número de cifras significativas utilizadas en el texto.

Velocidad de la luz en elvacío	$c = 2.998 \times 10^8$ m/seg
Magnitud de la carga del electrón.	$e = 1.602 \times 10^{-19}$ coul
Constante de Planck	$h = 6.626 \times 10^{-34}$ joule-seg
	$\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34}$ joule-seg
	$= 0.6582 \times 10^{-15}$ eV-seg
Constante de Boltzmann	$k = 1.381 \times 10^{-23}$ joule/°K
	$= 8.617 \times 10^{-5}$ eV/°K
Número de Avogadro	$N_0 = 6.023 \times 10^{23}$/ mol
Constante en la ley de Coulomb	$1/4\pi\epsilon_0 = 8.988 \times 10^9$ N - m^2/coul^2
Masa en reposo del electrón	$m_e = 9.109 \times 10^{-31}$ kg $= 0.5110$ MeV/c^2
Masa en reposo del protón	$m_p = 1.672 \times 10^{-27}$ kg $= 938.3$ MeV/c^2
Masa en reposo del neutrón	$m_n = 1.675 \times 10^{-27}$ kg $= 939.6$ MeV/c^2
Unidad de masa atómica ($C^{12} \equiv 12$)	$u = 1.661 \times 10^{-27}$ kg $= 931.5$ MeV/c^2
Magnetón de Bohr	$\mu_b = e\hbar/2m_e = 9.27 \times 10^{-24}$ A-m^2 (o joule/tesla)
Magnetón nuclear	$\mu_n = e\hbar/2m_p = 5.05 \times 10^{-27}$ A - m^2 (o joule/tesla)
Radio de Bohr	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 = 5.29 \times 10^{-11}$ m $= 0.529$ Å
Energía de Bohr	$E_1 = -m_e e^4/(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 = -2.17 \times 10^{-18}$ joule $= -13.6$ eV
Longitud de onda de Compton para el electrón	$\lambda_C = h/m_e c = 2.43 \times 10^{-12}$ m $= 0.0243$ Å
Constante de estructura fina	$\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c = 7.30 \times 10^{-3} \simeq 1/137$
kT a temperatura ambiente	$k300°\text{K} = 0.0258$ eV $\simeq 1/40$ eV

1 eV $= 1.602 \times 10^{-19}$ joule

1 joule $= 6.242 \times 10^{18}$ eV

1 Å $= 10^{-10}$ m

1 F $= 10^{-15}$ m

1 barn (bn) $= 10^{-28}$ m^2

Indice

Absorción estimulada, 457
Absorción, estimulada, 458
  espectros de, 129
  umbral de, 399
Absortividad, 23
Abundancia isotópica, 497, 507
Abundancia nuclear, 603
Acción, 144
Acoplamiento JJ, atómico, 416
  nuclear, 619
Acoplamiento LS, 415
  principio de exclusión en el, 815
  reglas de selección para el, 424
Acoplamiento Russell-Saunders, 415
Actínidos, 391
Aleación de Heusler, 573
Afinidad electrónica, 392
Agujero, en banda llena, 538
  y el positrón, 70
  y los espectros de rayos-X, 395
Aislante, 521
Alcalinos, 391
  espectro de los, 408
Alternación de intensidades, 587
Anchura de línea, 103
Anchura de línea neutral, 103
Anchura de los niveles de energía, 665
Anchura de nivel, 695
Angulo sólido, 125
Aniquilación, 67
Aniquilación de pares, 67
Antiferromagnetismo, 577
Antineutrino, 647
  detección del, 657
Apareamiento, en el enlace covalente, 492
  en núcleos, 620
  en superconductividad, 560
Atenuación exponencial, 71
Atomo con un electrón, eigenfunciones del, 289
  ecuación de Schrödinger para el, 283
  eigenvalores del, 286
Atomo muónico, 138
Atracción de Van der Waals, 516
Autoconsistencia, 375

Balance detallado, 444, 724
Banda aislada, 521
Banda de conducción, 522
Banda de energía, 518
Banda de valencia, 522
Banda parcial, 573
Banda permitida, 519
Banda prohibida, 519
Banda de conducción, 522
  anchura de, 527
  de valencia, 522
  espectros de, 501
  teoría de, 517
Barión, 730, 737
Barra de control, 687
Barrera centrífuga, 297
Barrera de potencial, 240
Bombeo óptico, 461
Bosón, 364, 442
Bosón intermedio, 727, 732
Brecha de energía, 563
Bremsstrahlung, 64

Cálculo de Fock, 377
Calor específico, 452
Calor específico de Schottky, 480, 581
Calor específico electrónico, 473
Campo crítico, 558
Campo piónico, 717

Cantidad dinámica, 179
Capa, 294, 380
Capacidad calorífica, 452
Captura electrónica, 644
Carácter de la simetría nuclear, 504, 588
Carácter de simetría, 365
nuclear, 504, 588
Catástrofe ultravioleta, 31
Causalidad y la teoría cuántica, 107, 174
Cavidad radiante; *véase* Radiación del cuerpo negro.
Celda unitaria, 521
Centro repulsivo, 710
Ciclo del carbono, 691
Ciclo protón-protón, 692
Coeficiente de atenuación, 73
Coeficiente de Hall 523
Coeficiente de reflexión, 229,237
Coeficiente de transmisión, 238
Coeficientes A y B de Einstein, 460
Complejo conjugado, 785
Condensación de Bose, 468
Condición de dispersión de Bragg, 84, 533
Conductividad, 523, 537
Conductividad extrínseca, 539
Conductividad intrínseca, 554
Conductores, 522
Configuración, 388
Conjugación de carga, 733
Conservación del número leptónico, 726
Constante de acoplamiento, beta, 650, 655
electromagnética, 723
nuclear, 721
Constante de Boltzmann, 30
Constante de estructura fina, 148, 723
Constante de Planck, 34, 52
Constante de Rydberg, para masa nuclear finita, 137
para hidrógeno, 128
para masa nuclear infinita, 133
Constante de Stefan-Boltzmann, 22
Continuidad de las eigenfunciones y sus derivadas, 192 256
Contracción de Lorentz, 759
Conversión interna, 664
Coordenadas polares esféricas, 282
Corriente de recombinación, 545
Corriente térmica, 545
Corrimiento al rojo gravitacional, 669
Corrimiento de Compton, 55, 58
Corrimiento de Lamb, 325, 329
Corrimiento Doppler, y el efecto Mössbauer, 668
relativista, 68
Cuantización, de la acción, 144
de la energía; *véase* Cuantización de la energía
del espacio, 323
del flujo magnético, 565
del impulso angular del spin, 324
del impulso angular orbital, 130, 303
Cuantización de la energía del átomo con un electrón,132
de radiación, 50
en la teoría de Schrödinger, 194
por las reglas de Wilson-Sommerfeld, 142
postulado de Planck de la, 34
y el principio de incertidumbre, 94
Cuantización de la energía de Planck, 38, 478
y las reglas de Wilson-Sommerfeld, 142
y la teoría de Schroedinger, 266
Cuantización del flujo, 566
Cuantización espacial, 323
Cuark, 741
Cuerpo negro, 20
Curva de estabilidad, 644

Decaimiento al equilibrio, 640
Decaimiento alfa, 247, 635
energía del, 636
Decaimiento beta, 642
constante de acoplamiento del, 650, 656
elementos de matriz para, 649
energía del, 646
espectros del, 649
interacción del, 650, 656, 732; *véase también* Interacción débil
reglas de selección para, 653
Decaimiento beta permitido, 654
Decaimiento beta prohibido, 654
Decaimiento gama, 660
reglas de selección para el, 663
Deficiencia de masa, 600
Degeneración, 148, 288
de eigenfunciones atómicas en un campo aplicado, 44
para el potencial de Coulomb, 387, 614
por intercambio, 359
Degeneración de un gas, 467
Degeneración por intercambio, 359
Demagnetización adiabática, 580
Densidad de carga, atómica, 292, 378
nuclear, 593
Densidad de carga nuclear, 593
Densidad de estados, en una banda, 527
para una partícula libre, 524
y la masa efectiva, 537
Densidad de masa nuclear, 595
Densidad de probabilidad, 170
radial, 292
Densidad de probabilidad radial total, 379
Dependencia con el spin del potencial nucleónico, 705

Derivada parcial, 161
Desdoblamiento hiperfino, 339, 423, 588
Determinante de Slater, 364
Deuterio, 138
Deuterón, 702
Diagrama de niveles de energía, 40
de rayos -X, 394
Diamagnetismo, 566
Difracción, fórmula general para la, 82
de partículas, 84, 104
y el principio de incertidumbre, 93, 104
Dilatación del tiempo, 758
Diodo túnel, 251, 547
Dispersión de Coulomb, 672, 781
sección trasversal para la, 126
Dispersión de Rayleigh, 503
Dispersión de Rutherford, 119, 781
sección trasversal para, 126, 672
Dispersión de Thomson, 59
sección trasversal para, 71
Dispersión elástica, 673
Dispersión inelástica, 673
Dispersión múltiple, 117
Dispersión neutrón-protón, 708
Dispersión nuclear, 116, 673
Distancia de atenuación, 73
Distancia de máximo acercamiento, 121
Distancia de penetración, 231
Distribución de Boltzmann, 32, 440, 448, 778
y los sistemas cuánticos, 456
Distribución de Bose, 446
para fotones, 463
Distribución de Fermi, 448
Distribución de Maxwell, 32, 440
Dominios, 574
Dualidad onda-partícula, 87
y la materia, 81
y la radiación, 62

Ecuación de eigenvalores, 311
Ecuación de Klein-Gordon, 723
Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, 187
argumento de plausibilidad para la, 191
y la cuantización de la energía, 194
y la ecuación de onda clásica, 245
Ecuación de Schrödinger, y el postulado de de Broglie, 166
argumento de plausibilidad para la. 162
y la ley de Newton, 224
y la teoría de Dirac, 167
y los operadores diferenciales, 180
Edad, de la tierra, 642
del universo, 691
Efecto Compton, 54
teoría del, 57
y el principio de incertidumbre, 93
Efecto de la degeneración en gases, 467
Efecto fotoeléctrico, 47
sección trasversal para, 71
teoría de Einstein del, 50
Efecto Hall, 523
Efecto isotópico, 560
Efecto Josephson, 564
Efecto Meissner, 558
Efecto Mössbauer, 666
Efecto Raman, 503
Efecto Ramsauer, 245, 274, 673
Efectos de muchos cuerpos, en núcleos, 624
en sólidos, 577
Efecto Paschen-Bach, 431
Efecto Zeeman, 324, 425
Efecto Zeeman anómalo, 426
Efecto Zeeman normal, 426
Eigenfunción, 191, 203, 310
propiedades necesarias de la, 192
Eigenfunción del spin, 366
Eigenfunciones antisimétricas, 359
Eigenfunciones atómicas, 378
Eigenfunciones de Bloch, 530
Eigenfunción simétrica, 359
Eigenvalor, 203, 311
Electrodinámica cuántica, 339, 342, 718, 722
Electrón, 86, 737
Electrón de conducción, 53, 472
Electrón ópticamente activo, 408
Elemento de matriz, del decaimiento beta, 649
del cuadrupolo eléctrico, 663
del dipolo eléctrico, 342
del dipolo magnético, 663
nuclear, 650
y las reglas de selección, 343
Elemento de matriz nuclear, 650
Elementos, origen de los, 691
tabla periódica de los, 386
Elementos superpesados, 641
Emisión de electrones, 644
Emisión de positrones, 644
Emisión espontánea, 342, 457, 458
Emisión estimulada, 342, 457, 458
Emisión retardada de neutrones, 687
Emisión termiónica, 475
Emisividad, 23
Energía de apareamiento, 620
Energía de decaimiento, alfa, 637
beta, 646
Energía de enlace, 133, 600
por nucleón, 601
Energía de enlace nuclear, 600
Energía de Fermi, 450
en semiconductores, 544
para metales, 475

Energía de ionización, 141, 391
Energía de la masa en reposo, 767
Energía del punto cero, 261, 498
del campo electromagnético, 342
y la estabilidad del átomo, 296
Energía relativista, 766
Energía relativista total, 767
Enlace covalente, 488
iónico, 485
metálico, 516
molecular, 515
Enlace heteropolar, 487
Enlace homopolar, 492
Enlace iónico, 485
Enlace metálico, 516
Enlace molecular, 515
Entropía, 477
Equilibrio térmico, 444, 773
Equipartición de la energía, 30 30
Espectro continuo de rayos-X, 63
Espacio fase, 142, 476
Espectro de Rayleigh-Jeans, 31
Espectro del cuerpo negro de Planck, 34
teoría del, 31, 463
Espectro de líneas, 126
formación del, 133, 407
Espectro de líneas de rayos-X, 393
Espectro electromagnético, 54
Espectro vibracional, molecular, 496
nuclear, 681
Espectrometría de masas, 595
Espectros de absorción y emisión, 135
Espectros electrónicos moleculares, 500
Espectros ópticos, 407
Espectros rotacionales, molecular, 493
nuclear, 680
Espectros vibro-rotacionales, 496
Estadística cuántica, 440
Estado base, 133
Estado cuántico, 40, 203
Estado de singulete, 367
Estado de una partícula, 673
Estado de triplete, 367
Estado excitado, 133
Estado metaestable, 347, 457
Estado superconductor, 557
Estados de energía continuos, 140
y la teoría de Schrödinger, 200
Estados de muchas partículas, 676
Estereorradián, 678
Estructura fina, 146, 326
en el átomo de hidrógeno, 338
regla del intervalo de Landé para la, 419
Excitación óptica, 407
Experimento de Davisson y Germer, 82
Experimento de Franck-Hertz, 140
Experimento de Geiger-Marsden, 118
Experimento de Michelson y Morley, 753
Experimento de Reines-Cowan, 657
Experimento de Stern-Gerlach, 322
Experimento de Taylor, 105
Experimento de Thomson, 85
Experimento de Phipps-Taylor, 324
Experimento de Wu, 657, 734
Exponencial compleja, 787
Extrañeza, 730

Factor de aumento, 443
Factor de Boltzmann, 425
Factor de inhibición, 441
Factor *g* de Landé, 429
del spin, 324
orbital, 319
Factor *g* del spin, 324
Factor *g* orbital, 319
Fermión, 365, 441
Ferrimagnetismo, 577
Ferromagnetismo, 567, 571
Finitud de las eigenfunciones y sus derivadas, 192
Fisión, 602, 683
Fisión espontánea, 641, 685
Fisión inducida, 685
Flujo, probabilidad, 238
Flujo de probabilidad, 239
Fonón, 464, 557
y la superconductividad, 560
Formación estelar, 690
Fórmula de Balmer, 128
Fórmula de Breit-Wigner, 676
Fórmula de la masa, 605
Fórmula de Moseley, 398
Fórmula para la masa nuclear, 605
Fórmula semiempírica de la masa, 606
Fosforescencia, 347
Fotoconductividad, 539
Fotoelectrón, 47
Fotón, 50
impulso del, 56
masa en reposo del, 56
Fragmentos de la fisión, 683
Frecuencia angular, 164
Frecuencia de Thomas, 813
Fuerza de intercambio, 371
Fuerza interatómica, 486
Fuerza nuclear; 588 *véase también* Fuerza nucleónica
constante de acoplamiento de la, 721
Fuerza nucleónica, 701; *véase también* Fuerza nuclear
Función de distribución, 21; *véase también* el tipo específico

Función de onda, 169, 203
interpretación de la, 169, 90
y la densidad de probabilidad, 170
Función de onda de grupo, 223, 233
Función trabajo, 51, 475
Fusión, 602, 688

Gas de electrones, 471
Gas de Fermi, 471
Gas de fotones, 52, 463
Gas noble, 391
Gráfica de Curie, 650
Gravitón, 733
Grupo de ondas, 100
Grupo de transición, 392

Hadrón, 736
Halógeno, 392
Helicidad, 658, 726
Helio líquido, 468
Hipercarga, 739
Hiperón, 736
Hipótesis de Einstein del fotón, 50, 89
Histéresis, 577

Impulso angular; *véase* tipo específico
Impulso angular del spin total, 367, 415
Impulso angular orbital, 303
cuantización del, 130
leyes de conservación mecánico-cuánticas para el, 307
números cuánticos del, 302
total, 415
y la paridad, 346
Impulso angular orbital total, 415
Impulso angular total, 332, 415
Impurezas aceptoras, 540
Impurezas donantes, 539
Independencia de la carga, 706
Indistinguibilidad, 357
y estadísticas cuánticas, 440
Inducción magnética, 566
Integración numérica, 794
Intensidad del campo magnético, 566
Interacción débil 725; *véase también* Decaimiento beta
Interacción de intercambio, 573
Interacción directa, 671, 673
Interacción electromagnética, 656, 732
Interacción fuerte; *véase también* Interacción nuclear, 725, 732
Interacción gravitacional, 656, 732
Interacción nuclear, 656, 732; *véase también* Interacción fuerte
conservación de la paridad en la, 676
Interacción nuclear de apareamiento, 619
Interacción residual de Coulomb, 413
Interacción spin-órbita, 328
en átomos alcalinos, 411
en átomos multielectrónicos, 413
en el potencial nuclear, 617
en el potencial nucleónico, 713
fórmula general para, 335
y la precesión de Thomas, 811
Interacción spin-órbita nuclear, 615
Interacciones, comparación de propiedades, 656, 732
Interacciones fundamentales, 732
Intercambio de niveles de una partícula, 360
de fonones, 560
de piones, 717
Interpretación de Copenhague, 106
Introducción de impurezas (doping), 539
Inversión del NH_3, 250
Inversión de población, 461
Ión molecular de hidrógeno, 488
Isóbaro, 716
Isótopo, 597
Isospin, 715

Lantánidos, 391
Laser, 342, 457
Laser de rubí, 461
Leptón, 726, 737
Ley de Curie, 567
Ley de decaimiento, 639
Ley de decaimiento exponencial, 639
Ley de Dulong-Petit, 452
Ley de Kirchoff, 24
Ley del desplazamiento de Wien, 22
y el espectro de Planck, 37
Ley de Lenz, 566
Ley de Stefan, 22
y el espectro de Planck, 37
Leyes de conservación, 733
para reacciones nucleares, 669
Límite clásico, para el impulso angular orbital, 307
de la teoría cuántica, 149, 225
para el oscilador armónico simple, 40, 201
para el potencial escalón, 239
Límite de las series, 127
Línea de Schmidt, 623
Línea espectral, 126, 134
Linealidad de la ecuación de Schrödinger, 167, 203
Longitud de onda de Compton, 58
Longitud de onda de de Broglie, 81
Longitud de onda recíproca, 97
Longitud propia, 759

Magnetización, 566
Magnetismo permanente, 578
Magnetón de Bohr, 319
Magnetón nuclear, 588
Magnitud de interacción, beta, 656
  electromagnética, 720
  gravitacional, 732
  nuclear, 718
Masa atómica, 595
Masa efectiva, en redes cristalinas, 535
  en núcleos, 611
Masa en reposo, 765
Masa nuclear, 595
Masa reducida, 136, 280
Masa relativista, 600, 765
Maser, 457
Mecánica matricial, 310
Mecánica matricial de Heisenberg, 310
Mesón eta, 732, 737
Mesón *K*, 727, 737
Mesón omega, 738
Mesón pi; *véase* Pión
Mesón ro, 738
Mesón; *véase también* Tipo específico, 737
Microscopio de Bohr, 93
Modelo colectivo, 623
Modelo de Bohr, 130
  y los niveles de energía del, 336
Modelo de capas, 612
  estados excitados del, 679
Modelo de Kronig-Penney, 532
Modelo de la gota, 604
Modelo del gas de Fermi, 609
Modelo del electrón libre, 524
Modelo de Rutherford, 119
Modelo de Sommerfeld, 146
  y los niveles de energía del hidrógeno, 338
Modelo de Thomson, 115
Modelo óptico, 673, 697
Modelo vectorial, 308, 335
Moderador, 688
Molécula-orto, 505
Molécula-para, 505
Molécula polar, 487
Momento cuadrupolar eléctrico nuclear, 590
Momento eléctrico cuadrupolar, 590, 624, 681
Momento dipolar magnético total, 426
Momento magnético dipolar, atómico, 426
  del spin, 324
  nuclear, 588, 623
  orbital, 318
Momento magnético dipolar del spin, 324
Momento magnético dipolar nuclear, 588
Momento magnético dipolar orbital, 319
Movilidad, 523
Movimiento de una partícula independiente, en átomos, 376
  en núcleos, 609
Multiplete, 420
Mutipolaridad, 662
Muón, 725, 737

Naturaleza dual de la radiación; *véase* Dualidad onda-partícula
Neutrino, 648
  electrónico, 726
  muónico, 725
Neutrino electrónico, 726, 737
Neutrino muónico, 725, 737
Neutrón, 589, 737
Neutrón inicial de la fusión, 686
Niveles de energía del helio, 371
Niveles de energía del hidrógeno, 132, 338
Niveles isobáricos análogos, 717
Normalización, 173, 185
  en una caja, 222
Normalización en una caja, 222
Notación espectroscópica, 388, 396, 419
Núcleo blanco, 598
Núcleo compuesto, 671, 676
Núcleo descendiente, 636
Núcleo, descubrimiento del, 119
Nucleón, 589
Núcleo-precursor, 636
Núcleo residual, 598
Núcleos espejo, 631, 681
Número atómico, 123, 399, 587
Número bariónico, 724
  conservación del, 728
Número complejo, 785
  y la ecuación de Schrödinger, 166
Número cuántico 40; *véase también* tipo específico
Número cuántico azimutal, 147, 288
Número cuántico del spin electrónico, 324
  nuclear, 505, 588, 621
  total, 418
Número cuántico del spin nuclear, 504
Número cuántico de nodo radial, 613
Número cuántico magnético, 288
Número cuántico principal, 147, 288, 614
Número cuántico rotacional, 493
Número cuántico vibracional, 496
Número de masa, 586
Número de onda, 164
Número imaginario; *véase también* Número complejo, 785
Número mágico, 607, 641
Número neutrónico, 603

Onda de de Broglie, 81, 96
Ondas de materia, 81, 95

Operador de impulso angular, 253, 808
Operador de intercambio, 707
Operador diferencial, 180
Operador hamiltoniano, 311
Operador, impulso angular, 304, 808
  laplaciano, 281, 807
  de impulso lineal, 181
Operador laplaciano, 281, 807
Ortogonalidad, 275, 362, 401
Oscilador armónico; *véase* Oscilador armónico simple
Oscilador armónico simple, límite clásico del, 149, 173
  densidad de probabilidad para el estado base del, 179
  eigenfunciones del, 267
  eigenvalores del, 266
  función de onda del estado base del, 168
  niveles de energía en la teoría cuántica antigua del, 40
  potencial para el, 265
  solución en series del, 801

Paradoja de los gemelos, 669
Paramagnetismo, 566
Parámetro de impacto, 120
Par de Cooper, 560, 524
Par electrón-positrón, 65
Paridad intrínseca, 724
Paridad, 264, 345
  conservación de la, en interacciones electromagnéticas, 658
  conservación de la, en interacciones nucleares, 676
  intrínseca, 724
  no-conservación de la, en el decaimiento beta, 657
  nuclear, 621
  y el impulso angular orbital, 346
  y las reglas de selección, 347, 653, 664
Paridad nuclear, 621
Parte imaginaria, 785
Parte real, 785
Partícula alfa, 117
  dispersión de, 117
  modelo de la, 631
Partícula delta, 738
Partícula lambda, 727, 737
Partícula libre, densidad de estados para la 524
  comportamiento mecánico cuántico de la, 218
Partícula omega, 731, 737
Partícula producto, 598
Partícula proyectil, 598
Partículas idénticas, 356
Partícula sigma, 731, 737
Partícula Xi, 731, 737
Partón, 741
Penetración de barreras, 244, 247, 638
Penetración de la región clásicamente excluída,231
Pión, 717, 737
Pirómetro óptico, 20, 37
Polinomio de Hermite, 806
Positrón, 65
Positronio, 67, 137
Postulado de Bohr de la cuantización, 129
  y el postulado de de Broglie, 145
  y las reglas de Wilson-Sommerfeld, 143
Postulado de Born, 90, 170
Postulado de de Broglie, 81
  y el postulado de la cuantización de Bohr, 144
  y el pozo cuadrado infinito, 262
  y el principio de incertidumbre, 99
  y la ecuación de Schrödinger, 163
Postulado de Goudsmit-Uhlenbeck, 326
Postulado de la relatividad de Einstein, 755
Potencial centrífugo, 402, 614
Potencial cero, 218
Potencial de contacto, 475
Potencial de frenamiento, 47
Potencial de Jastrow, 710
Potencial de pozo cuadrado, 252
  solución analítica del, 795
  solución numérica del, 789
Potencial de Serber, 707
Potencial de un pozo cuadrado infinito, 257
  estado base del, 184
Potencial de Yukawa, 721
Potencial escalón, ($E < V_0$), *224*, ($E > V_0$), 234
Potencial neto, atómico, 374
  nuclear, 609, 619
Potencial nucleónico, 702
Precesión de Larmor, 320
Precesión de Thomas, 329, 811
Principio de complementaridad, 88
Principio de correspondencia, 149
Principio de exclusión, 362, 374
  en el acoplamiento *LS*, 424, 815
  y la estructura atómica, 393
  y la estructura nuclear, 609
Principio de Franck-condon, 501
Principio de Heisenberg; *véase* Principio de incertidumbre
Principio de incertidumbre, 91
  consecuencias del, 105
  interpretación del, 93
  y el postulado de de Broglie, 99
  y el pozo cuadrado infinito, 187
  y la dualidad onda-partícula, 232
  y la energía del punto cero, 261

y la estabilidad del átomo, 296
y la naturaleza estadística de la teoría cuántica, 174
verificación del, 668
Principio de indeterminación; *véase* Principio de incertidumbre
Principio de Pauli; *véase* Principio de exclusión,
Principio de superposición, 90
Producción de pares, 65
sección transversal para, 71
teoría de Dirac para, 69
Producción de rayos-X, 62
Propiedad de reciprocidad, 239
Protón, 587, 737
Punto lambda, 468
Punto terminal, 647

Quanta del campo, 732
Quantum, del campo, 733

Radiación acústica, 464
Radiación del cuerpo negro, y la teoría de la "Gran explosión", 38
fórmula espectral de Planck para la, 34
medidas espectrales de la, 20
teoría de Planck de la, 31, 463
teoría de Rayleigh-Jeans de la, 24
y el gas de fotones, 53, 463
y la cavidad, radiante, 23
Radiación del cuerpo negro universal a $3^{0}k$, 38, 691
Radiación por dipolos eléctricos, 772
Radiación, por una carga acelerada, 769
por átomos y el modelo de Bohr, 129
por átomos y la teoría de Schrödinger, 205
Radiación térmica 19; *véase también* Radiación de cuerpo negro
Radiactividad, 636
Radiancia, 20
Radiancia espectral, 20
Radio, atómico, 115, 382
de Bohr, 130, 294
nuclear, 594
Radio del electrón, 327
Radio nuclear, 594
Rapidez de decaimiento, 638
alfa, 250
beta, 651
gama, 662
Rapidez de transición, para decaimiento alfa, 250
para decaimiento beta, 651
para decaimiento gama, 662
para la radiación del dipolo eléctrico, 342
y las reglas de selección, 340
Rayo gama, 660
Reacción en cadena, 683
Reacción nuclear, 669
balance de energía en la, 598
Reactor autorregenerable, 688
Reactor, de fusión, 688
nuclear, 683
Rectificadores, 544
Red cristalina, 515
Reflexión total interna frustrada, 246
Región de agotamiento, 553
Región excluída clásicamente, 256
Región extrínseca, 553
Regla del intervalo, 420
en el desdoblamiento hiperfino, 590
Regla del intervalo de Landé, 420, 590
Reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld, 142
Reglas de selección de Fermi, 653
Reglas de selección de Gamow-Teller, 654
Reglas de selección, para átomos alcalinos, 410
para átomos con un electrón, 340
para el acoplamiento *LS*, 424
para el decaimiento beta, 653
para el decaimiento gama, 663
y el principio de correspondencia, 149
para rayos-X 398
y los elementos de matriz, 343
Reglas de selección para rayos-X, 396
Relación de recurrencia, 804
Resistencia, 522, 537
Resistividad, 523
Resonancia bariónica, 738
Resonancia de spin electrónico, 430
Resonancia de un núcleo compuesto, 676
Resonancia magnética nuclear, 457
Resonancia mesonica, 738
Resonancia por tamaño, 245, 673
Reversibilidad del tiempo, 745
Rotor rígido, 313, 493, 679

Saturación, en el enlace molecular, 491
de fuerzas nucleares, 662, 713
Sección trasversal, 70
fotoeléctrica, 71
para dispersión de Compton,71
para dispersión de Coulomb, 126
para dispersión de Thomson, 71
para producción de pares, 71
total para fotones, 71
Sección trasversal diferencial, 125
Sección trasversal para dispersión de Compton, 71
Semiconductor, 522, 538
Semiconductor tipo-n, 539
Semiconductor tipo-p, 540
Separación de variables, 187

con un electrón, 281
en la ecuación de Schrödinger del átomo
Series de Balmer, 129
Series de Brackett, 129
Series de Lyman, 128
Series de Paschen, 129
Series de Pfund, 129
Series de Pickering, 155
Series de radiactivas, 640
Simultaneidad, 754
Sistema de referencia del éter, 752
Sistema de referencia inercial, 752
Sólido covalente, 516
Sólido iónico, 516
Sólido metálico, 517
Sólido molecular, 516
Solución en series de la ecuación de Schrödinger, 801
Solución numérica de la ecuación de Schrödinger, 789
Spin del electrón, 324
nuclear, 504, 588, 621
total, 415
Spin isotópico; *véase* Isospin
Spin nuclear, 504, 588, 621
Subcapa, 301, 385
propiedades de la subcapa cuando está llena, 301, 424
Subcapa llena, 301, 424
Superconductor, 557
tipo II, 564
Superfluído, 468
Supernova, 693
Susceptibilidad, 566

Tabla periódica, 386
Temperatura crítica, 557
Temperatura de Fermi, 552
Temperatura de Curie, 571
Temperatura de Debye, 454
Teorema CPT. 735
Teorema del virial, 313
Teoría BCS, 560
Teoría cuántica antigua, 19
crítica de la, 151, 347
Teoría de Brueckner, 607
Teoría de Debye del calor específico, 454
Teoría de Dirac, y el decaimiento beta, 648
y la producción de pares, 69
y la teoría de Schrödinger, 167
y los niveles de energía del hidrógeno, 336
Teoría de Hartree, 374
Teoría de la "gran explosión", 38, 689
Teoría de la relatividad, 749
y el spin electrónico, 326
Teoría del calor específico de Einstein, 452
Teoría del cuerpo negro de Rayleigh-Jeans, 24
Teoría del mesón, 717
Teoría de Yukawa, 717
Teoría SU (3), 739
Teorías y modelos, 585, 624
Término antisimétrico, 605
Término de apareamiento, 605
Tiempo de vida, 343, 639
Tiempo de vida comparativo, 652
Tiempo propio, 758
Tierra rara, 390
Transformaciones galileanas, 750
Transformación de Lorentz, 761
Transiciones por un dipolo eléctrico, 340, 661
Transistor, 547
Trayectoria media libre, 523
Tubo de rayos-X, 63
Tunelamiento, 244, 638, 684

Unicidad, de las eigenfunciones y sus derivadas, 192
de la eigenfunción del átomo con un electrón, 285
Unidad angstrom, 23
Unidad barn, 678
Unidad de masa, 597
Unidad electrónvolt, 49
Unidad fermi, 587
Unión p-n, 544

Valencia, 392
Valor de expectación, 176
regla general para el, 182
Valor *FT*, 652
Valor-*Q*, 598, 670
Variable escondida, 107
Vector de Poynting, 771
Velocidad de Fermi, 552
Velocidad de grupo, 98
Velocidad de onda, 98
Vida media, 639

Z-efectiva, 380
Zona de Brillouin, 534

—ooo—